Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100643

Державний реєстраційний номер: 0119U100025

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Поліоксометалати та ортованадати лантанідів

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код за ЄДРПОУ: 02070803

Місцезнаходження: вул. 600-річчя, 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380432508930

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, буд. 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 539.535

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Поліоксометалати, ортованадати та оксіортосилікати перехідних металів і лантанідів для створення новітніх матеріалів

Назва роботи англійською:

Polyoxometalates, orthovanadates and oxyorthosilicates of transition metals and lanthanides for creation of new materials

Реферат українською:

У рамках кристалоенергетичної теорії ізоморфних заміщень В.С. Урусова виконано розрахунок енергій змішування (параметрів взаємодії) і температурних інтервалів стабільності твердих розчинів зі структурою циркону складу Lu1–xLnxVO4, де Ln – лантаніди, скандій та ітрій. Показано, що зі збільшенням номера Ln в ряду Ce–Lu обчислені енергії змішування і критичні Т розпаду твердих розчинів закономірно зменшуються. Визначено межі заміщень за різних Т, термодинамічна фазова стабільність і Т переходу в метастабільний стан. Наведено діаграму термодинамічної стабільності твердих розчинів Lu1–xLnxVO4. Результати роботи можуть бути використані під час пошуку складів матриць і активаторів нових лазерних та інших матеріалів. Розроблено умови синтезу Na9[Pr(W5O18)2]·34,25H2O з підкисленого до Z = 0,80 водного розчину Na2WO4 з відношенням □(Pr):□(W)=1:10 з висолюванням дією ацетону. Методами ІЧ та КР–спектроскопії показано належність аніону в синтезованій сполуці до структури Пікока–Уіклі. Розроблена в роботі методика одержання натрію декавольфрамопразеодимату(III) є новою та відрізняється тим, що дозволяє синтезувати середню, а не кислу сіль, що може бути використано для синтезу інших середніх натрію гетерополідекавольфрамолантанідатів(III). Проведено РСА монокристалу й одержано фундаментальні дані для кристалічної структури Na9[Pr(W5O18)2]·34,25H2O (a=18,272(5), b=18,512(5), c=20,865(6), □=113,60(3), □=97,79(3), □=90,36(3), V=6393(3) Å3, Z=2, триклінна сингонія, пр.гр. P-1). З аналізу результатів РСА встановлено, що структури поліоксовольфраматів подібного типу (як за параметрами ячейки, так і за складом і характером упаковки) в літературі й базах даних структур не описані. Методом СЕМ показано, що розмір зерен порошку Na9[Pr(W5O18)2]·34,25H2O знаходиться у межах 200 450 нм. Однофазність синтезованої солі підтверджено рівномірним контрастом поверхні в режимі ВЕС і рівномірним розподілом Pr, Na, W, O під час сканування поверхні в характеристичному рентгенівському випромінюванні.

Реферат англійською:

The energies of mixing (interaction parameters) and temperature ranges of stability of solid solutions Lu1–xLnxVO4 (where Ln is a rare-earth element (REE), scandium, or yttrium) with the zircon structure were calculated using the crystal-energy theory of isomorphous miscibility. It was shown that, with increasing atomic number of REE in the Ce–Lu series, the calculated energies of mixing and critical decomposition temperatures of the solid solutions regularly decrease. The substitution limits at various T, the thermodynamic phase stability, and the T of transition to a metastable state were determined. The thermodynamic stability diagram of the REE vanadate solid solutions Lu1 – xLnxVO4 was presented. The results of the work can be used for searching the compositions of matrices and activators of new laser and other materials. The conditions for the synthesis of novel praseodymium(III)-containing salt, Na9[Pr(W5O18)2]·34.25H2O, with heteropoly tungstate anion were determined. By the methods of chemical analysis, FT-IR, and FT-Raman spectroscopy it was shown that sodium heteropoly decatungstopraseodymate(III) Na9[Pr(W5O18)2]·34.25H2O was precipitated from Na2WO4 solution under Z=□(H+)/□(WO42–)=0.80 after adding of acetone. By FT-IR and FT-Raman spectroscopy, the heteropoly anion is shown to belong to the Peacock–Weakley structural type. By the method of SEM it was shown that the grain size of Na9[Pr(W5O18)2]·34.25H2O is within the range of 200–450 nm. Homogeneity of the obtained phase was confirmed by the uniform contrast of the surface in the BEC mode. An X-ray single crystal analysis was carried out

and crystal structure for Na9[Pr(W5O18)2]·34.25H2O (a=18.272(5), b=18.512(5), c=20.865(6), □=113.60(3), □=97.79(3), □=90.36(3), V=6393(3) Å3, Z= 2, triclinic, P-1) was determined. It was established that no polytungstate structures of this type (both the unit cell parameters and the composition and packing within the structure) are described in the literature.

Індекс УДК: 546;54-386, 546.2, 546.2, 54-386, 546.786+546.776+546.65+548.73+546.05

Коди тематичних рубрик: 31.17, 31.17.15.25, 31.17.15.31, 31.17.29.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Розанцев Георгій Михайлович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Методика синтезу Pr(III)-вмісного гетерополівольфрамату

Назва НТП англійською: Procedure for synthesis of Pr(III)-containing polyoxotungstate

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: люмінесцентні матеріали, магнітні матеріали

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено умови синтезу Na9[Pr(W5O18)2]·34,25H2O з підкисленого до Z = 0,80 водного розчину Na2WO4 з відношенням □(Pr):□(W)=1:10 з висолюванням дією ацетону. Розроблена в роботі методика одержання натрію декавольфрамопразеодимату(III) є новою та відрізняється тим, що дозволяє синтезувати середню, а не кислу сіль, що може бути використано для синтезу інших середніх натрію гетерополідекавольфрамолантанідатів(III). З аналізу результатів РСА встановлено, що структури поліоксовольфраматів подібного типу (як за параметрами ячейки, так і за складом і характером упаковки) в літературі й базах даних структур не описані.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції: Наукові установи, Виробники люмінофорів

Перспективні ринки: Ринок люмінесцентних матеріалів

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 250

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Спільні права на НТП

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 400

Очікуваний термін окупності (років): 5

Додаткова інформація: -

IX. Бібліографічний опис

Розанцев Г.М., Радио С.В., Игнатьева В.В., Гумерова Н.И., Марийчак А.Ю. Комплексообразование в растворе и периодичность термодинамических характеристик поливольфрамолантанидатов [Текст] : монография. (Сер.

"Химия полиоксометаллатов") / Донец. нац. ун-т им. Василя Стуса, Учеб.-науч. ин-т химии. – Винница : ТВОРИ, 2019. – 212 с. : рис., табл. - Бібліогр.: с. 202-212. - 20 прим. - ISBN 978-966-949-001-8 (12,6 д.а.)

Гетьман Е.И., Радио С.В., Игнатова Л.Б., Арданова Л.И. Энергии смешения (параметры взаимодействия), пределы замещений и фазовая стабильность твердых растворов Lu1–xLnxVO4 (Ln = Ce–Yb, Sc, Y) // Журнал неорганической химии. – 2019. – Т. 64, № 1. – С. 86-92. DOI 10.1134/S0044457X19010094

Get'man E.I., Radio S.V., Ignatova L.B., Ardanova L.I. Energies of Mixing (Interaction Parameters), Substitution Limits, and Phase Stability of Solid Solutions Lu1–xLnxVO4 (Ln = Ce–Yb, Sc, Y) // Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2019. – Vol. 64, No. 1. – P. 118–124. DOI: 10.1134/S0036023619010091

Усачев О.М., Рысич А.В., Величко М.П., Розанцев Г.М., Радио С.В. Состояние изополивольфрамат-анионов в водно-глицериновой среде // Вопросы химии и химической технологии / Voprosy khimii i khimicheskoi tekhnologii. – 2019. – № 2. – С. 47–54. ISSN 0321-4095.

Get'man E.I., Radio S.V. Predicting the Substitution of Rare-Earth Elements with Cerium in the Solid Solutions Based on Nanoscale Ln2SiO5 (Ln = Tb–Lu, Y) // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології / Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii (ISSN (Print): 1816-5230, ISSN (Online): 2617-3794). – 2019. – Vol. 17, No. 4. – P. 701–710. DOI: https://doi.org/10.15407/nnn.17.04.701

Mariichak O.Yu., Rozantsev G.M., Radio S.V. Synthesis and crystal structure of sodium heteropoly decatungstoterbate(III) Na9[Tb(W5O18)2]·34H2O // Current chemical problems (CCP-2019): book of abstracts of the II International (XII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 19–21, 2019, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2019. – P. 55.

Поліщук О.Р., Дуванова Е.С., Кравчук Ю.В., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Солі мангану з паравольфрамат Б-аніоном // Current chemical problems (CCP-2019): book of abstracts of the II International (XII Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 19–21, 2019, Vinnytsia / Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2019. – P. 59.

Mariichak Oleksandra Yu., Kaabel Sandra, Karpichev Yevgen A., Kapitanov Illia V., Rozantsev Georgiy M., Radio Serhii V. Novel isostructural heteropoly salts with Peacock-Weakley type anion Na9[Ln(W5O18)2]·35H2O and thulium or ytterbium heteroatoms // Open Readings 2019. 62nd International Conference for Students of Physics and Natural Sciences. March 19–22, 2019. Abstract book. Vilnius, LITHUANIA. – P. 144.

Get'man E.I., Ardanova L.I., Radio S.V. Prediction of substitution limits and stability of the solid solutions based on orthovanadates of rare-earth elements // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (17 квітня 2019 р.). Матеріали конференції. – Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2019. – С. 99-100.

Дуванова Е.С., Поповська О.Ю., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Взаємодії в системі Zn2+– Ni2+ – WO42– (Z = 1,00) – H+/ OH– – H2O, (CW = 0,01 моль/л), I(NaNO3)=0,1 моль/л // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (17 квітня 2019 р.). Матеріали конференції. – Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2019. – С. 193.

Марійчак О.Ю., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Особливості кристалічної структури та синтез натрію біс-пентавольфрамотуліату Na9[Tm(W5O18)2]·35H2O // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (17 квітня 2019 р.). Матеріали конференції. – Житомир: Вид-во ЖДУ ім. І. Франка, 2019. – С. 209-211.

Розанцев Г.М., Усачов О.М., Велічко М.П., Рисіч А.В. Взаємодія кобальту (II) з підкисленими водно-гліцериновими розчинами натрію вольфрамату // XI Всеукраїнська наукова конференція студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2019" (ХКЧ'19, Харків 22–24 квітня 2019 р.), тези доповідей. – Х.: ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2019. –С. 19.

Get'man E.I., Radio S.V. Forecasting a substitution of rare-earth elements by cerium in solid solutions based on nanostructured Ln2SiO5, Ln = Tb–Lu, Y // International Conference «FUNCTIONAL MATERIALS FOR INNOVATIVE ENERGY – FMIE-2019», dedicated to the seventieth anniversary of Member of the N.A.S. of Ukraine Anatolij P. Shpak. May 13–15, 2019, G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the N.A.S. of Ukraine, Kyiv. 2019. Функціональні матеріали для інноваційної енергетики. Збірка тез конфере

Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М., Синтез солей з паравольфрамат Б-аніоном // Матеріали наукової конференції професорсько-викладацького складу, наукових працівників і здобувачів наукового ступеня за підсумками науководослідної роботи за період 2017–2018 рр. (16–17 травня 2019 р.): у 2-х томах. Том 2. Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2019. – С. 135.

Марійчак О.Ю., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Синтез та дослідження лантанід-вмісних поліоксометалатів Na9[Ln(W5O18)2]·nH2O (Ln = La–Yb) // Матеріали наукової конференції професорсько-викладацького складу, наукових працівників і здобувачів наукового ступеня за підсумками науководослідної роботи за період 2017–2018 рр. (16–17 травня 2019 р.): у 2-х томах. Том 2. Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2019. – С. 138-140.

Марійчак О., Розанцев Г., Радіо С. Зміна структурних параметрів у рядах ізоструктурних Ln(III)-вмісних поліоксовольфраматів // Збірник наукових праць: XVII наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2019» (Львів, 2-5 червня 2019 р.). – Львів: ВЦ ЛНУ імені Івана Франка, 2019. – С. У6.

Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Синтез паравольфрамату Б-кадмію // Збірник наукових праць: XVII наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2019» (Львів, 2-5 червня 2019 р.). – Львів: ВЦ ЛНУ імені Івана Франка, 2019. – С. 310.

Mariichak O.Yu., Rozantsev G.M., Baumer V.N., Pichon C., Sutter J.-P., Radio S.V. Synthesis of Polyoxometalates from the Systems A+–Y3+–WO42––H+–H2O (A+ = NH4+, K+), and M2+–Y3+–WO42––H+–H2O (M2+ = Mg2+, Zn2+ // 10th International Conference of Chemistry Toulouse-Kiev (June 3-5, 2019, Toulouse, France), P63. https://ictk-10.sciencesconf.org/data/pages/08_POSTER_FINAL.pdf

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Хаджинов Ілля Васильович
д. е. н., 08.00.02

Перелік осіб-виконавців

Баумер В'ячеслав Миколайович
(к. х. н., 02.00.01)

Гетьман Євген Іванович
(д. х. н., 02.00.01)

Гумерова Надія Ісмагілівна
(к. х. н., 02.00.01)

Дуванова Елла Сергіївна

Марійчак Олександра Юріївна

Олексій Юлія Анатоліївна

Поповська Олена Юріївна

Радіо Сергій Вікторович
(к. х. н., 02.00.01)

Румянцева Жанна Олександрівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Радіо Сергій Вікторович

Телефон

+38 (095) 397-43-17

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

