Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U002349

Державний реєстраційний номер: 0122U000762

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-02-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Сполуки d- та f-металів із лакунарними поліоксометалат-аніонами. Прогнозування взаємодії в Ln1−xLn'xAsO4 системах.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

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, буд. 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, 380432508778

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: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 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.): 1049.855

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Сполуки d- та f-металів із поліоксометалат-аніонами та прогнозування взаємодії у складнооксидних системах

Назва роботи англійською:

Compounds of d- and f-metals with polyoxometalate anions and prediction of interaction in complex oxide systems

Реферат українською:

У рамках кристалоенергетичної теорії ізоморфних заміщень розраховано енергії змішування та критичні температури розпаду (стабільності) твердих розчинів ортоарсенатів лантаноїдів зі структурою циркону та зі структурою монациту, а також високотемпературних надпровідників на основі феруму – оксіарсенідів ітрію та лантану. Побудовано діаграми, які дозволяють прогнозувати термодинамічну стабільність твердих розчинів. Результати роботи можуть бути корисними під час вибору співвідношення компонентів у змішаних матрицях і кількості активатора в люмінесцентних, лазерних та інших практично важливих матеріалах, а також у матрицях для іммобілізації токсичних і радіоактивних відходів, для створення нових високотемпературних надпровідників. Здійснено розв'язання наукової задачі, яка полягає в одержанні нових термодинамічних характеристик процесів поліконденсації у водних розчинах W(VI) з низькою кислотністю з утворенням йонних асоціатів між паравольфрамат Б-аніонами та катіонами d-металів, що дозволило створити методики цілеспрямованого синтезу нових солей поліоксометалатів і одержати монокристальні зразки подвійних солей натрію та d-металів із аніоном паравольфрамату Б. Встановлено, що солі купрум(II) із аніоном паравольфрамату Б проявляють високу антибактеріальну активність проти E. coli ATCC 25922, розроблено нові методики виготовлення поліоксометалат-вмісних антимікробних покриттів на основі біорозкладного полімеру полілактидної кислоти, які відповідають принципам «зеленої» хімії. Такі плівки можна використовувати в якості біоцидних поверхонь у приміщеннях із великим скупченням людей (бомбосховища, лікарні тщо) із метою унеможливлення поширення бактерій і вірусів.

Реферат англійською:

Within the framework of the crystal energy theory of isomorphous substitutions, the mixing energies and critical temperatures of decomposition (stability) of solid solutions of lanthanide orthoarsenates with zircon structure and monazite structure, as well as high-temperature superconductors based on ferrum or yttrium and lanthanum oxyarsenides were calculated. Diagrams have been built that allow predicting the thermodynamic stability of solid solutions. The results of the work can be useful when choosing the ratio of components in mixed matrices and the amount of activator in fluorescent, laser, and other practically important materials, as well as in matrices for immobilization of toxic and radioactive waste, for the creation of new high-temperature superconductors. The scientific problem was solved, which consists in obtaining new thermodynamic characteristics of polycondensation processes in aqueous solutions of W(VI) with low acidity with the formation of ionic associates between paratungstate B anions and cations of d-metals, which made it possible to create procedures for the targeted synthesis of new salts of polyoxometalates and obtain single-crystal samples of double sodium salts and d-metals with paratungstate B anion. It was established that copper(II) salts with paratungstate B anion exhibit high antibacterial activity against E. coli ATCC 25922, new procedures for manufacturing of polyoxometalate-containing antimicrobial coatings based on biodegradable polymer of polylactide acid, which correspond to the principles of "green" chemistry. Such films can be used as biocidal surfaces in crowded areas (bomb shelters, hospitals, etc.) in order to prevent the spread of bacteria and viruses.

Індекс УДК: 546, 546.75, 546.2, 54-386, 548 , 544Ф16; 539.2:54 , 544.33; 541.341/.344; 544.34 , 543.62

Коди тематичних рубрик:31.17.15, 31.17.15.19, 31.17.15.25, 31.17.29.05, 31.15.17, 31.15.19, 31.15.25, 31.19.15

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: Енергії змішування та критичні температури розпаду (стабільності) твердих розчинів у системах ортоарсенатів лантаноїдів

Назва НТП англійською: Mixing energies and critical temperatures of decomposition (stability) of solid solutions in lanthanide orthoarsenate systems

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Із використанням кристалохімічного підходу в наближенні регулярних твердих розчинів розраховано енергії змішування та критичні температури розпаду (стабільності) твердих розчинів у системах Sc1–xLnxAsO4, Ln = Sm–Lu, Y; Tb1–xLnxAsO4, Ln = Y, Tm; Lu1–xLnxAsO4; Ln = Sm–Yb, Sc, Y зі структурою циркону та La1–xLnxAsO4, Ln = Ce, Pr, Nd зі структурою монациту. З'ясовано, що зі збільшенням номера рідкісноземельного елементу (РЗЕ) обчислені енергії змішування та критичні температури розпаду твердих розчинів закономірно зменшуються, що обумовлено зменшенням іонних радіусів РЗЕ в ряду від La до Lu.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів, Підвищення рівня підготовки студентів закладів вищої освіти

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Наукові установи, Підприємства атомної енергетики

Перспективні ринки: Ринок хімічного матеріалознавства

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Енергії змішування (параметри взаємодії) та критичні температури розпаду (стабільності) твердих розчинів зі структурою ZrCuSiAs у системах Y1–xLnxFeAsO0.6, де Ln = La–Er

Назва НТП англійською: Mixing energies (interaction parameters) and critical temperatures of

decomposition (stability) of solid solutions with the ZrCuSiAs structure in the Y1–xLnxFeAsO0.6 systems, where Ln = La–Er

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У рамках кристалоенергетичного підходу розраховано енергії змішування (параметри взаємодії), критичні температури розпаду (стабільності) й побудовано куполи розпаду твердих розчинів систем Y1–xLnxFeAsO0.6 (Ln = La–Er, 0<x<1.0) та La1–xLnxFeAsO0.65 (Ln – лантаноїд), компоненти яких є ізоструктурними ZrCuSiAs. Показано, що величина енергії змішування визначається головним чином різницею в розмірах структурних одиниць, що заміщуються. Побудовано діаграму, яка дозволяє прогнозувати області термодинамічної стабільності твердих розчинів, а також границі заміщень (x) у залежності від температури розпаду або температуру розпаду за заданою границею заміщень обмежених рядів твердих розчинів у всіх системах. У межах похибки методу результати розрахунків не протирічать експериментальним даним, наявним у літературі для систем La1–xYxFeAsO0.6 та подібних систем La1–yYyFeAsO, La0.8Y0.2FeAsO0.7 та Y0,95La0:05FeAsO1-yH0.15, а також La1–xYxFeAsO0.6 і La1–xSmxFeAsO0.85. Результати роботи можуть бути корисними під час вибору співвідношення компонентів у «змішаних» матрицях і кількості активатору в високотемпературних надпровідниках і ефективних магнітних матеріалах.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів, Підвищення рівня підготовки студентів закладів вищої освіти

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Наукові установи

Перспективні ринки: Ринок інноваційних матеріалів, Ринок високотемпературних надпровідників

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Методики синтезу подвійних солей натрію та d-металів із аніоном паравольфрамату Б

Назва НТП англійською: Procedures of synthesis of double salts of sodium and d-metals with paratungstate B anion

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук; 85.42 Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено нові методики синтезу, які дозволяють використовувати кислотність замість pH і контролювати у вихідному розчині природу потрібного ізополіаніону. Вперше синтезовано вісім солей ($Na_4Mn_3[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 26H_2O$, $K_6Mn_2[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot nH_2O$ (n = 17 або 24), $Na_4Co_3[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 30H_2O$, $Na_6Cu_2[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 22H_2O$, $Na_2Cu_4[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 22H_2O$, $Na_2Cu_3(CuOH)_2[W_{12}O_{40}(OH)_2]\square 32H_2O$, $Cu_5[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 2Cu(OH)_2\cdot 30H_2O$), з яких структурно охарактеризовано п'ять. За кислотності Z = 1,00 виділено дві нові структури калію-мангану(II) паравольфрамату Б $K_6Mn_2[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 17H_2O$ і $K_6Mn_2[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 24H_2O$, які відрізняються не тільки вмістом води, а й поліедрами атомів калію, з координаційними числами 8 і 9, та 8, 9 і 10 відповідно.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення рівня підготовки студентів закладів вищої освіти

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Наукові установи, Заклади вищої освіти

Перспективні ринки: Ринок освітніх послуг, Ринок інноваційних матеріалів

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

S. V. Radio, E. I. Get'man, and L. I. Ardanova, "Substitution limits and thermodynamic stability of solid solutions in HTSC based on iron and yttrium oxyarsenides", Low Temperature Physics. 2023. –Vol. 49, No. 2. – P. 197–203. https://doi.org/10.1063/10.0016895

Duvanova E.S., Radio S.V., Rozantsev G.M., Yutilova K.S. Synthesis and thermolysis of sodium–manganese paratungstate Na5[Mn2.5(W12O40(OH)2)]·36H2O // Питання хімії та хімічної технології / Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2023, No. 6. – P. 92-98. http://dx.doi.org/10.32434/0321-4095-2023-151-6-92-98

Zubov, E.E., Fita, I., Puzniak, R., Wisniewski, A. Microscopic description of magnetic nonequilibrium phenomena in erbium orthoferrite. // Physical Review B, 2023, 107(22), 224407. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.224407

Radio, S. V.; Get'man, E. I.; Ardanova, L. I. Substitution Limits and Thermodynamic Stability of Solid Solutions in HTSC Based on Iron and Yttrium Oxyarsenides // Fiz. Nyzk. Temp. 2023. – Vol. 49, No. 2. – P. 212–219. http://fnt.ilt.kharkiv.ua/index.php/fnt/article/view/8990

Get'man, E.I., Oleksii, Y.A., Ardanova, L.I., Radio, S.V. Prediction of Isomorphous Substitutions and Stability of Solid Solutions with □-YF3 Structure in Lu1–xLnxF3, Ln = Sm–Yb Systems. In: Fesenko, O., Yatsenko, L. (eds) Nanooptics and Photonics, Nanochemistry and Nanobiotechnology, and Their Applications. Springer Proceedings in Physics. Springer, Cham. – 2023. – Vol. 280. – P. 95-105.

E. Get'man, Yu. Oleksii, O. Mariichak, L. Ardanova, S. Radio Iron-containing superconductors from the viewpoint of chemists: thermodynamic stability and substitution limits in La1–xLnxFeAsO1–y high-temperature superconductors (Ln = Ce–Er and Y). In Novel frontiers in materials science: Innovative components for next-generation superconductor technologies, monograph. 2nd edition. Vinnytsia: Vasyl' Stus DonNU, 2023. – P. 61-85. ISBN 978-966-999-321-2

E. Zubov Reentrant Induced Superconductivity In Hybrid Structure With High Barrier Transparency. In Novel frontiers in materials science: Innovative components for next-generation superconductor technologies, monograph. 2nd edition. Vinnytsia: Vasyl' Stus DonNU, 2023. – P. 130-157. ISBN 978-966-999-321-2

Книжник І.А., Кордиш О.М., Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Дослідження рівноваг утворення поліоксовольфраматів барію в підкислених розчинах ортовольфрамату натрію та їх виділення у твердій фазі // Current chemical problems (CCP-2023): book of abstracts of the VI International (XVI Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 21–23, 2023, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsi

Попова А.В., Книжник І.А., Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Ізополіоксовольфрамати купруму(II) у підкислених водно-диметилформамідних розчинах ортовольфрамату натрію // Current chemical problems (CCP-2023): book of abstracts of the VI International (XVI Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 21–23, 2023, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2023. – P. 37.

Цабак Н.Г., Кордиш О.М., Дуванова Е.С., Книжник І.А., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Взаємодія катіонів кальцію з ортовольфрамат-аніонами при Z = 1,00–1,50 // Current chemical problems (CCP-2023): book of abstracts of the VI International (XVI Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 21–23, 2023, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editor-in-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2023. – P. 41.

Гетьман Є.І., Марійчак О.Ю., Радіо С.В. Прогнозування границь ізоморфних заміщень і термодинамічної стабільності твердих розчинів Y1–xLnxVO4, Ln = Ce–Lu, Sc // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (19 квітня 2023 року). Матеріали конференції. – Житомир: ПП «Євро-Волинь, 2023. – С. 46.

Цабак Н.Г., Кордиш О.М., Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Поліоксовольфрамати стронцію в підкислених розчинах і твердій фазі // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (19 квітня 2023 року). Матеріали конференції. – Житомир: ПП «Євро-Волинь, 2023. – С. 148.

Розанцев Г., Радіо С., Дуванова Е. Стан іонів Вольфраму (VI) в підкисленому оцтовою кислотою розчині // Збірник наукових праць: XIX наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2023» (Львів, 29-31 травня 2023 р.). – Львів: Видавництво від А до Я, 2023. – С. 18 (У5).

Марійчак О., Розанцев Г., Радіо С. Синтез Ln-вмісних солей A9[X(W5O18)2]·nH2O з аніоном зі структурою Пікока–Уіклі // Збірник наукових праць: XIX наукова конференція «Львівські хімічні читання – 2023» (Львів, 29-31 травня 2023 р.). – Львів: Видавництво від А до Я, 2023. – С. 94 (Н29).

Radio S.V., Mariichak O.Yu., Ardanova L.I., Get'man E.I. Prediction of Isomorphous Substitution Limits and Thermodynamic Stability for Y1–xLnxVO4 (Ln = Ce–Lu, Sc) Solid Solutions with Zircon-Type Structure // The International research and practice conference "Nanotechnology and nanomaterials" (NANO–2023). Abstract book. (16–19 August 2023, Bukovel). – Kyiv: LLC APF POLYGRAPH SERVICE. – P. 364.

I. Fita , E. E. Zubov, R. Puzniak, and A. Wisniewski. Exchange BiAs Effect in Compensated Ferrimagnets. 13-th Joint European Magnetic Symposia. 27-th August to 1-st September 2023, Madrid, Spain. Book of Abstract, p. 827.

Марійчак О.Ю., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Синтез і кристалічна структура солей з ізополі- ([W12O40(OH)2]10–) та гетерополі- ([Ln(W5O18)2]9–) аніонами // XI Міжнародна науково-практична інтернет-конференція здобувачів вищої освіти тамолодих учених «Хімія і сучасні технології» / тези доповідей (06-07 грудня 2023 р, ДВНЗ «УДХТУ», Дніпро). –У 6-и томах. –Т. І. –Дніпро: ДВНЗ УДХТУ. –2023. – С. 30–31.

Kordysh O. M., Knyzhnyk I. A., Rozantsev G. M. Modeling of Equilibria in an Acidified Solution of Sodium Orthotungstate in the Presence of Calcium(II) Ions // International scientific-practical conference "Current issues of science, education and society: theory and practice": conference proceedings (Aarhus, Denmark, October 20, 2023). Aarhus, Denmark: Scholarly Publisher ICSSH, 2023. P.59-60.

Oleksii Kordysh, Ivan Knyzhnyk, Sergii Radio, Georgii Rozantsev Modeling of Equilibria in an Acidified Solution of Sodium Orthotungstate in the Presence of Barium(II) ions // Proceedings of the 12th International scientific and practical conference. SSPG Publish. Stockholm, Sweden. 2023. Pp. 187-192.

К.С. Ютілова, Г.М. Розанцев, О.М. Швед, А.В. Кравчук Кристалохімія. Лабораторний практикум. Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2023. 61 с.

К. С. Ютілова, О. М. Швед, Г. М. Розанцев, Л. С. Лісова, Н. С. Марценюк Лабораторний практикум з фізичних методів дослідження речовин. Вінниця: ДонНУ імені Василя Стуса, 2023. 132 с.

ДУВАНОВА Елла Сергіївна Паравольфрамат-аніони в складі іонних пар з Mn2+, Co2+ та Cu2+ в розчині з низькою кислотністю та в складі солей. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 102 «Хімія». – Донецький національний університет імені Василя Стуса, Вінниця, 2023. Дата захисту – 22 червня. Диплом Доктора філософії Н23 № 000950. https://svr.naqa.gov.ua/#/defense/1503

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Гринюк Роман Федорович
д.ю.н., 12.00.01, 12.00.02

Перелік осіб-виконавців

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

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

Дуванова Елла Сергіївна
(д.філософ, 102)

Зубов Едуард Євгенович
(д. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.07)

Кордиш Олексій Миколайович
(д.філософ, 102)

Марійчак Олександра Юріївна

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

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна