

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U101322

Державний реєстраційний номер: 0117U004136

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Синтез калікс[4]аренів, які містять чотири фрагменти 12-азакраун-4, що приєднані по нижньому краю каліксарену за допомогою амідних містків, а також гомологічних рядів ДБІКЕ шляхом алкілювання біс (бензімідазоїл-2-метилен)-сульфідів дитозилатами поліетиленгліколів. Аналіз впливу послідовного введення фрагментів краун(азакраун)-етерів в молекули калікс[4]аренів на спектрально-люмінесцентні властивості їх комплексів з лантанідами. Визначення умов включення отриманих комплексів лантанідів до супрамолекулярних агрегатів на основі ПАР. Виявлення зв'язків між розмірно-зарядовими й електронними параметрами фторидів лантанідів(II,III) та їх здатністю до обмінних реакцій із сольовим розплавом й комплексоутворення з його компонентами. Квантовохімічні розрахунки електронної будови оксиду алюмінію, алюмінатів та силікатів елементів II-III груп зі структурою гранату. Побудова та верифікація 2D-QSPR моделей для параметрів флуоресценції різноманітних органічних сполук, зокрема гетероциклів та макрогетер

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1147.903

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Прогнозування, молекулярний дизайн й спрямований синтез нових координаційних сполук металів II та III груп Періодичної системи із заданими оптичними властивостями.

Назва роботи англійською:

Prediction, molecular design and new coordination compounds metals of II and III groups the Periodic system directed synthesis with given optical properties.

Реферат українською:

Мета - розробка методів синтезу комплексів лантанідів (III) з калікс[4]аренами та з похідними дибензімідазо-краун-етерів (ДБІКЕ); аналіз закономірностей змін люмінесцентних властивостей комплексів лантанідів під впливом структурно-топологічних чинників (аза)краунвмісних каліксаренів та сірковмісних аналогів ДБІКЕ при комплексоутворенні. Об'єкт дослідження - похідні п-трет-бутилкалікс[4]арену, бензо-15-краун-5 та бензо-18-краун-6; бензо[d]імідазоли, дибензімідазо-краун-етери та їх комплексні сполуки з лантанідами (III); синтез, комплексоутворюючі та екстракційні властивості тетразаміщених 5,11,17,23-п-трет-бутилкалікс[4]аренів. Отримано тетразаміщені похідні п-трет-бутилкалікс[4]арену з залишками молекул амідобензокраун-етеру, карбонілмоноаза-12-краун-4-етеру та 12-краун-4-етеру. Проведено оцінювання екстракційних та комплексоутворюючих властивостей каліксаренів відносно катіонів металів s-, d-елементів. Показано, що каліксарен з фрагменти N-карбонілмоноаза-12-краун-4-етеру - ефективний комплексон катіонів натрію та кальцію, та формує з ними моноядерні комплекси ($\lg K > 5$), а з катіонами барію та стронцію комплексами складу 1:1 і 1:2 (ліганд-катіон). Досліджено вплив макроциклічних (12-аза-краун-4, бензо-15-краун-5 і бензо-18-краун-6) замісників на координуючі та спектральні властивості похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену та їх комплексів з f-металами. Досліджено комплексоутворення з іонами лантанідів (III) та спектрально-люмінесцентні властивості сірковмісного аналогу ДБІКЕ. Розглянуто вплив фізичних і хімічних факторів на розчинність сполук у сольових розплавах, пов'язаних з процесами дисоціації, сольватації та комплексоутворення між розчиною речовиною та розпавленою сіллю. Методом газозфазного горіння отримані зразки легованого Cr^{3+} $\text{p}^*\text{-Al}_2\text{O}_3$ з середнім розміром частинок ~ 35 нм. Проаналізовано вплив структури сполук - похідних бензо[d]імідазолів (у т.ч. їх комплексів з Lu^{3+}) на їх спектрально-люмінесцентні властивості.

Реферат англійською:

Aim of research - development of methods for synthesis of lanthanide (III) complexes with calix [4] arenes and with dibenzimidazo-crown ether derivatives (DBICE); analysis regularities changes of lanthanide complexes luminescent properties under influence of structural-topological factors (aza)crown-containing calixarenes and sulfur-containing analogues of DBICE during complex formation. Objects of research - derivatives of p-tert-butylcalix[4]arene, benzo-15-crown-5 and benzo-18-crown-6; benzo[d]imidazoles, dibenzimidazo-crown ethers and their complex compounds with lanthanides (III); synthesis, complexing and extraction properties of tetrasubstituted 5,11,17,23-p-tert-butylcalix[4]arenes. Tetrasubstituted derivatives of p-tert-butylcalix[4]arene with residues molecules of amidobenzocrown ether, carbonylmonoase-12-crown-4-ether and 12-crown-4-ether were obtained. Extraction and complexing properties of calixarenes with respect to metal cations of s-, d-elements have been evaluated. It is shown that calixarene from fragments of N-carbonylmonoase-12-crown-4-ether is an effective complexon of sodium and calcium cations, and forms mononuclear complexes with them ($\lg K > 5$), and with barium and strontium cations complexes of 1:1 and 1:2 (ligand cation). Influence of macrocyclic (12-azacrown-4, benzo-15-crown-5 and benzo-18-crown-6) substitutes on coordinating and spectral properties of p-tert-butylcalix derivatives[4]arene and their complexes with f-metals has been studied. Complexation with lanthanide (III) ions and spectral-luminescent properties of sulfur-containing analogue DBICE have been studied.

Influence of physical and chemical factors on solubility of compounds in salt melts associated with dissociation, solvation and complexation processes between solution substance and molten salt is considered. Samples of doped Cr^{3+} p^* - Al_2O_3 with an average particle size of ~ 35 nm were obtained by gas-phase combustion method.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.7/8; 548.736; 544.6/621.039+544.164;544.135; 537.37:546.623.31+546.65;535.37 541.65

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Камалов Герберт Леонович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Активованій Cr^{3+} Al_2O_3 з середнім розміром часток 35 нм для іспитів в макетах пристроїв. Сполука Tb(III) з калікс[4]ареном, модифікованим чотирма бензо-18-краун-6-фрагментами, для сенсорів на іони лужних металів. Тетразаміщені по нижньому ободу похідні трет-бутилкалікс 4 арени з фрагментами моноаза-12-краун-4 та амідобензо-18-краун-6. Модель зв'язку структури краун-похідних бензо[d]імідазолів з їх спектрально-люмінесцентними властивостями.

Назва НТП англійською: Activated by Cr^{3+} Al_2O_3 with an average particle size 35 nm for exams in device layouts. Compound Tb(III) with calix[4]arene, modified with four benzo-18-crown-6-fragments, for alkali metal ion sensors. Tetrasubstituted on lower rim derivatives of tert-butylcalix 4 arena with fragments of monoaza-12-crown-4 and amidobenzo-18-crown-6. Connection model of crown-derived benzo[d]imidazoles structure with their spectral-luminescent properties.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Зразки легованого Cr^{3+} $\text{p}^*\text{-Al}_2\text{O}_3$ з середнім розміром частинок ~35 нм були отримані методом газофазного горіння. Показано, що іони Cr^{3+} в $\text{p}^*\text{-Al}_2\text{O}_3$ займають октаедричні позиції в об'ємі та на поверхні наночастинок, Локальна структура навколо іонів Cr^{3+} всередині наночастинок відрізняється від оточення іонів Cr^{3+} у поверхневому шар. Зроблено висновок, що особливості конденсації Al_2O_3 у високотемпературній реакційній зоні та висока швидкість охолодження продуктів горіння сприятимуть високій концентрації поверхневих центрів Cr^{3+} в отриманих зразках. Синтезовані тризаміщені по нижньому ободу похідних п-трет-бутилкалікс[4]арену, які містять залишки молекул моноаза-12-краун-4 та 12-краун-4-етерів. Проведено оцінку їх екстракційних та комплексоутворюючих властивостей щодо катіонів металів s-, d-елементів. Каліксарен, що містить фрагменти N-карбонілмоноаза-12-краун-4-етеру, є селективним комплексом катіонів натрію, кальцію (комплекси складу 1:1). Досліджено спектрально-люмінесцентні властивості калікс[4]аренів, модифікованих трьома фрагментами 12-краун-4(12-азакраун-4)-етерів.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: Підприємства хімічної галузі

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

S. Smola, N. Rusakova, O. Snurnikova, E. Alekseeva, T. Kirichenko. Peculiarities of structure and spectral-luminescent properties of carboxymethoxy-substituted calix[4]arenes and their complexes with lanthanides // Ukr. Chem. Journ. - 2020. - Vol. 86, no. 3. - P. 9-18.

S. Smola, Y. Fadieiev, M. Rusakova, O. Snurnikova, O. Alyeksyeyeva, N. Rusakova. Lower rim-modified calix[4]arenes with fragments of EDTA (DTPA) and their Ln(III) complexes (Ln = Yb, Lu): synthesis and NIR-luminescent properties. // Ukr. Chem. Journ. - 2020. - Vol. 86, no. 5. - P. 13-23.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Андронаті Сергій Андрійович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Єрьомін Олег Георгійович

(к. х. н.)

Єфрюшина Нінель Петрівна

(д. х. н.)

Іванов Юрій Едуардович

(к. х. н.)

Алексеева Олена Олександрівна

(к. х. н., 02.00.03)

Антонович Валерій Павлович

(д. х. н., 02.00.02)

Басок Степан Степанович

(к. х. н., 02.00.03)

Березовська Ірина Всеволодівна

(к. х. н., 02.00.01)

Вольчак Ганна Василівна

(к. х. н.)

Доценко Володимир Павлович

(д. х. н.)

Зінченко Віктор Федосійович

(д. х. н.)

Камалов Герберт Леонович

(д. х. н.)

Кириченко Тетяна Іванівна

(д. х. н.)

Коровін Олександр Юрійович

Кузьмін Віктор Євгенович

(д. х. н., 02.00.03)

Кулигіна Катерина Юріївна

(к. х. н.)

Огніченко Людмила Миколаївна

(к. х. н.)

Починок Ільвіра Вікторівна

Русакова Наталя Володимирівна

(д. х. н., 02.00.01, 02.00.01)

Семенішин Микола Миколайович

(к. х. н.)

Смола Сергій Сергійович

(к. х. н., 02.00.01)

Стоянова Ірина Вікторівна

(к. х. н.)

Хоменко Олена Володимирівна

(к. х. н.)

Чивирева Наталія Олексіївна

(к. х. н.)

Чіхічін Дмитро Герасимович

(к. х. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

Іллюшко Н. О.

+38 (048) 793-70-78

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

