

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U000364

Державний реєстраційний номер: 0122U000656

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження взаємодії у системах SiO-GeO₂ та ZnO-SiO (GeO) спектроскопічними методами. Синтез нано-структурованих матеріалів на основі ортоборатів зі структурою кальциту MBO₃ та дослідження впливу розміру частинок на люмінесцентні властивості Cr(III). Вивчення комплексоутворюючих властивостей біс(бензокраун-етерів) з фрагментом імідазолу з катіонами перехідних металів. Встановити структурні чинники, що визначають ефективність емісійних характеристик синтезованих БМГЦ. Формування баз даних щодо функціональних властивостей неорганічних сполук та їх сумішей – потенційних оптичних плівкоутворюючих матеріалів. Формування баз даних властивостей наночастинок – похідних різних неорганічних сполук.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 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, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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.): 1077.572

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові супрамолекулярні і наноструктурні системи на основі органічних і неорганічних сполук та їх гібридів: прогнозування, синтез та функціональні властивості

Назва роботи англійською:

New supramolecular and nanostructured systems based on organic and inorganic compounds and their hybrids: prognosis, synthesis and functional properties.

Реферат українською:

Об'єкти дослідження – макрогетероцикли з ароматичними та гетероароматичними фрагментами, комплексоутворення біс(бензокраун-етерів) імідазольними лінкерами з іонами перехідних металів; наноструктуровані матеріали на основі ортоборатів зі структурою кальциту MBO_3 та дослідження впливу розміру частинок на люмінесцентні властивості іонів Cr^{3+} ; наноструктури утворені взаємодією монооксиду Силіцію з діоксидом Германію та оксидом Цинку за різних умов; хемоінформатика (QSPR). Синтезовано модельні імідазольні сполуки, одна з яких не містить краун-етерних фрагментів, а інша – один краун-етерний цикл, а також два нових біс(бензокраун-етери) з о-нітро-замісниками в імідазольному фрагменті. Найбільш стійкі комплекси (lgK21 6–9) мають склад 2:1 і утворюються з усіма катіонами практично всіма лігандами, за невеликим винятком. Розроблено препаративні способи синтезу нових похідних 18, 19, 20 і 40-члених дибензімідазо-краун-етерів, що містять фрагменти двохатомних фенолів шляхом циклізації 1,2-(бензімідазоліл-2-оксометил)-етану з дитозилатами етерів на основі пірокатехину, резорцину, гідрокінону. Досліджена взаємодія монооксиду Силіцію з діоксидом Германію та оксидом Цинку за різних умов з утворенням наноструктур. Леговані іонами Cr^{3+} мікро- та нанорозмірні ортоборати індію та скандію MBO_3 отримані шляхом твердофазних реакцій та термолізом аморфного прекурсор, відповідно. Показано, що квантова ефективність люмінесценції мікророзмірних зразків $\text{InBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ сягає 0,60–0,70, тоді як для нанорозмірних зразків $\text{InBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ цей параметр становить лише 0,23–0,30. Зібрана інформація для оксигеновмісних неорганічних сполук – оксидів (прості, складні, змішані) щодо стандартної ентальпії утворення ($\Delta H_{\text{f}}^{\circ}$), яка за стандартних умов є мірою термодинамічної стійкості сполук, кількісним вираженням їх енерговмісту. Потенційною сферою використання синтезованих та досліджуваних матеріалів є електроніка, а також, екологічний, хімічний, фармацевтичний, біомедичний моніторинг.

Реферат англійською:

Research objects – macroheterocycles with aromatic and heteroaromatic fragments, complex formation of bis(benzocrown ethers) imidazole linkers with transition metal ions; nanostructured materials based on orthoborates with MBO_3 calcite structure and research on the effect of particle size on the luminescent properties of Cr^{3+} ions; nanostructures formed by the interaction of silicon monoxide with germanium dioxide and zinc oxide under different conditions; chemoinformatics (QSPR). Model imidazole compounds were synthesized, one of which does not contain crown ether fragments, and the other contains one crown ether ring, as well as two new bis(benzocrown ethers) with o-nitro substituents in the imidazole fragment. The most stable complexes (lgK21 6–9) have a composition of 2:1 and are formed with all cations by almost all ligands, with a few exceptions. Preparative methods for the synthesis of new derivatives of 18, 19, 20, and 40-membered dibenzimidazo crown ethers containing fragments of diatomic phenols by cyclization of 1,2-(benzimidazolyl-2-oxomethyl)-ethane with ditosylates of ethers based on pyrocatechin, resorcinol, hydroquinone. The interaction of silicon monoxide with germanium dioxide and zinc oxide under different conditions with the formation of nanostructures was investigated. Micro- and nanosized orthoborates of indium and scandium MBO_3 doped with Cr^{3+} ions were obtained by solid-phase reactions and thermolysis of an amorphous precursor, respectively. It is shown that the quantum efficiency of luminescence of micro-sized samples of $\text{InBO}_3:\text{Cr}^{3+}$ reaches 0.60–0.70, while for nano-sized

samples of $\text{InBO}_3\text{:Cr}^{3+}$ this parameter is only 0.23–0.30. Collected information for oxygen-containing inorganic compounds – oxides (simple, complex, mixed) regarding the standard enthalpy of formation ($\Delta H_{\text{f}}^{\circ}$), which under standard conditions is a measure of thermodynamic stability of compounds, a quantitative expression of their energy content.

Індекс УДК: 547.7/.8 , 547.898. 546.282/546.289:535.35/535.37:546.273:546.763

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: Дослідні зразки нових похідних 18, 19, 20 і 40-члених дибензімідазо-краун-етерів, що містять фрагменти двохатомних фенолів. Наноструктурні матеріали на основі монооксиду Силіцію, діоксиду Германію, та оксидом Цинку. Леговані іонами Cr^{3+} микро- та нанорозмірні ортоборати індію та скандію MBO_3 . Бази даних щодо ΔHo_{298} оксидів та їх сумішей, для створення 1D - QSPR моделей

Назва НТП англійською: Experimental samples of new derivatives of 18, 19, 20 and 40-membered dibenzimidazo crown ethers containing fragments of diatomic phenols. Nanostructured materials based on silicon monoxide, germanium dioxide, and zinc oxide. Micro- and nanosized orthoborates of indium and scandium MBO_3 doped with Cr^{3+} ions. Databases on ΔHo_{298} oxides and their mixtures, for creating 1D - QSPR models.

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: Підходи до спрямованого отримання сполук, люмінесцентні властивості яких здатні змінюватись під зовнішньою дією. Перевагою систем на основі гетероядерних лантанідних комплексів ДБІКЕ та їх ациклічних аналогів (подандів) у порівнянні з відомими сполуками лантанідів є можливість істотно підвищити квантовий вихід люмінесценції за рахунок наявності другого (гетерометалевого) центру. Пропоновані комплекси можуть мати принципово нові властивості, а саме – керовану люмінесценцію, що дозволить створювати ефективні 4f-випромінювачі. Нова інформація про вплив структури рецепторів на процеси утворення супрамолекул. Виробництво електрохімічних перетворювачів енергії. Розробка люмінофорів для пристроїв оптоелектроніки. Рецептори для комплексоутворення з іонами перехідних металів. Прогнозування ентальпій утворення простих і складних оксидів для створення нових компонентів тонкоплівкових покриттів на оптичні елементи (лінзи, призми та ін.) в інтерференційній оптиці.

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: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Оптоелектроніка

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:

ІХ. Бібліографічний опис

Юрій Іванов, Сергій Смола, Ільдар Ракіпов, Роксана Іванова, Герберт Камалов. Макрогетероцикли з фрагментами біс-(бензімідазоїл-2-метилен)-етеру: синтез і спектрально-люмінесцентні властивості. Збірник наукових праць: ХІХ Наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2023", Львів, 29–31 травня 2023 року – Львів: Видавництво від А до Я, 2023. – О19 с.

Khomenko O.V., Berezovskaya I.V., Poletaev N.I., Khlebnikova M.E., Efryushina N.P., Dotsenko V.P. Luminescent properties of Mn⁴⁺-doped α -Al₂O₃ obtained by combustion method Journal of Chemistry and Technologies. – 2022. – Vol. 30, № 4. – P. 537-546. doi: 10.15421/jchemtech.v30i4.259866

.Стельмах С.І. QSPR аналіз ліпофільності наночастинок золота з органічною оболонкою. Тези доповідей ХІ Міжнародної науково-практичної інтернет-конференції здобувачів вищої освіти та молодих учених "Хімія і сучасні технології" Державний вищий навчальний заклад "Український державний хіміко-технологічний університет" 06-07 грудня 2023 р. Дніпро, Україна. Том 1, С.107-108.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Єфрюшина Нінель Петрівна

(Д. Х. Н., 02.00.02)

Іванов Юрій Едуардович

(К. Х. Н.)

Бабенко Антон Віталійович

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.)

Кулигіна Катерина Юріївна

(К. Х. Н.)

Огніченко Людмила Миколаївна

(К. Х. Н.)

Смола Сергій Сергійович

(К. Х. Н., 02.00.01)

Хоменко Олена Володимирівна

(К. Х. Н.)

Чіхічін Дмитро Герасимович

(К. Х. Н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Іллюшко Н. О.

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

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

