Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U001689

Державний реєстраційний номер: 0122U000762

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Сполуки d- та f-металів із насиченими поліоксометалат-аніонами

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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.): 1021.521

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:

Встановленно умови синтезу сполук Вольфраму(IV) з катіонами Купруму(II) з підкислених водних розчинів натрію ортовольфрамату за різного значення кислотності (Z=1,08-1,42). За розробленою методикою синтезу отримано подвійні паравольфрамати Б натрію-купруму(II) Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22H2O, Na4Cu3[W12O40(OH)2]·28H2O, Na6Cu2[W12O40(OH)2]·31H2O. Склад сполук встановлено хімічним елементним аналізом. Належність солей до паравольфраматів Б доведена на основі результатів ІЧ спектроскопії в області коливань вольфрам-оксигенового каркасу. Na6Cu2[W12O40(OH)2]·31H2O показав високу антимікробну активність проти Escherichia coli ATCC 25922. В рамках антибактеріальних досліджень візначено мінімальну інгібуючу концентрацію МІК = 500 μг·мл–1 та мінімальну бактеріцидну концентрацію МБК = 700 μг·мл–1. Приведено результати дослідженя взаємодій у водному розчині Cd2+ – WO42– – H+(Z = 1,00) – H2O за методом pH-потенціометричного титрування та математичного моделювання за програмою CLINP2.1. З числа апробованих моделей найкраще описувала ескперимет та, яка складалася з йонних пар [CdOH+, W12O40(OH)2]9-, [Cd2+, W12O40(OH)2]8- [Cd2+, HW12O40(OH)2]7-, [Cd2+, H2W12O40(OH)2]6-, [Cd2+, W12O38(OH)2]4-, [Cd2+, HW12O38(OH)2]3-. Логарифми концентраційних констант утворення йонних пар, які були розраховані в ході моделювання, використовувалися для розрахунків логарифмів термодинамічних констант за методом Пітцера. Був добутий подвійний паравольфрамат Б натрію-кадмію(II) Na6Cd2[W12O40(OH)2]·25H2O, який досліджено методами хімічного елементного аналізу, скануючою електроної мікроскопії та ІЧ-спектроскопії. Встановлено умови утворення La(III)–вмісних поліоксовольфраматів у підкислених до кислотності Z = ◻(H+)/◻(WO42–) = 0.80 розчинах системи Na2WO4 – HNO3 – La(NO3)3 – H2O/органічний розчинник (ацетон, ацетонітрил, етанол; співвідношення вода:органічний розчинник = 50:50 об. %).

Реферат англійською:

The conditions for the synthesis of tungsten(IV) compounds with copper(II) cations from acidified aqueous sodium orthotungstate solutions at different acidity values (Z=1.08-1.42) have been established. According to the developed procedures for synthesis, sodium-copper(II) double paratungstates B Na2Cu4[W12O40(OH)2]·22H2O, Na4Cu3[W12O40(OH)2]·28H2O, Na6Cu2[W12O40(OH)2]·31H2O were obtained. The composition of compounds was established by chemical elemental analysis, FTIR and SEM. The belonging of the salts to paratungstates B was proved on the basis of the results of IR spectroscopy in the area of oscillations of the tungsten-oxygen framework. Na6Cu2[W12O40(OH)2]·31H2O showed high antimicrobial activity against Escherichia coli ATCC 25922. As part of antibacterial studies, the minimum inhibitory concentration of MIC = 500 μg·ml–1 and the minimum bactericidal concentration of MBK = 700 μg·ml–1 were determined. The results of the study of interactions in an aqueous solution of Cd2+ – WO42– – H+(Z = 1.00) – H2O by the method of pH-potentiometric titration and mathematical modeling by the CLINP2.1 program are given. Among the applied models, the one that best described the experiment, which consisted of ionic pairs [CdOH+, W12O40(OH)2]9-, [Cd2+, W12O40(OH)2]8- [Cd2+, HW12O40(OH)2]7-, [Cd2+, H2W12O40(OH)2]6-, [Cd2+, W12O38(OH)2]4-, [Cd2+, HW12O38(OH)2]3-. The logarithms of the concentration constants of the formation of ion pairs, which were stored during the simulation, were used to calculate the logarithms of the thermodynamic constants according to the Pitzep method. Double

sodium-cadmium(II) paratungstate B Na6Cd2[W12O40(OH)2]·25H2O was obtained, which was investigated by the methods of chemical elemental analysis, sSEM, and FTIR spectroscopy. The conditions for the formation of La(III)-containing polyoxotungstates in solutions of the system Na2WO4 – HNO3 – La(NO3)3 – H2O/organic solvent (acetone, acetonitrile, ethanol) acidified to Z=0.80 were established.

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: Методика синтезу Cu(II)–вмісних поліоксовольфраматів із антибактеріальними властивостями

Назва НТП англійською: Procedure for the synthesis of Cu(II)-containing polyoxotungstates with antibacterial properties

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали, 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: Встановленно умови синтезу сполук Вольфраму(IV) з катіонами Купруму(II) з підкислених водних розчинів натрію ортовольфрамату за різного значення кислотності. Отримано подвійні паравольфрамати Б натрію-купруму(II) $Na_2Cu_4[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 22H_2O$, $Na_4Cu_3[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 28H_2O$, $Na_6Cu_2[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 31H_2O$. $Na_6Cu_2[W_{12}O_{40}(OH)_2]\cdot 31H_2O$ показав високу антимікробну активність проти Escherichia coli ATCC 25922. В рамках антибактеріальних досліджень візначено мінімальну інгібуючу концентрацію МІК = 500 μг·мл–1 та мінімальну бактеріцидну концентрацію МБК = 700 μг·мл–1.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти, Наукові установи, Підприємства спеціальної хімії

Перспективні ринки: Ринок хімічної промисловості, Ринок матеріалів зі спеціальними властивостями

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: Методика синтезу La(III)–вмісних гертерополівольфраматів

Назва НТП англійською: Procedure for the synthesis of La(III)-containing heteropoly tungstates

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали, Методи, теорії

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

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Встановлено умови утворення La(III)–вмісних поліоксовольфраматів у підкислених до кислотності Z = □(H+)/□(WO42–) = 0.80 розчинах системи Na2WO4 – HNO3 – La(NO3)3 – H2O/органічний розчинник (ацетон, ацетонітрил, етанол; співвідношення вода:органічний розчинник = 50:50 об. %). Встановлено, що під час висолювання додаванням органічного розчинника відбувається кристалізація середніх солей Na9[La(W5O18)2]·nH2O (n = 32–35). Методом скануючої електронної мікроскопії встановлено однофазність синтезованих солей, визначено розміри зерен (від 140–300 нм для солі, виділеної з системи вода:ацетон, до 300–450 нм для солі, виділеної з системи вода:етанол). Проведене дослідження дозволило розширити перелік органічних розчинників, які можуть бути використані для синтезу середніх солей із гетерополіаніоном зі структурою Пікока–Уіклі з водно-органічних розчинів. Використання ацетонітрилу та етанолу для виділення Na9[La(W5O18)2]·nH2O може бути застосоване для синтезу солей із іншими гетероатомами-лантаноїдами.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія матеріалів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти, Наукові установи, Підприємства спеціальної хімії

Перспективні ринки: Ринок хімічної промисловості, Ринок матеріалів зі спеціальними властивостями

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

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. Vinnytsia: Vasyl' Stus DonNU, 2022. ISBN 978-99-999-303-8

Get'man E., Mariichak O., Oleksii Yu., Ardanova L., Radio S. Predicting of thermodynamic stability of nanomaterials based on Gd1–xLnxF3, Ln = Sm–Lu, Y solid solutions. In Nanoobjects & Nanostructuring. Collective Monograph: Volume I / Edited by Lidiya M. Boichyshyn and Oleksandr V. Reshetnyak. □ Mississauga, Ontario: Nova Printing Inc., 2022. – P. 31-44.

Duvanova, E.; Krasnou, I.; Krumme, A.; Mikli, V.; Radio, S.; Rozantsev, G.M.; Karpichev, Y. Development of Functional Composite Cu(II)-Polyoxometalate/PLA with Antimicrobial Properties. Molecules 2022, 27, 2510. https://doi.org/10.3390/molecules27082510

Кордиш О.М., Дуванова Е.С., Книжник І.А., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Моделювання рівноваг у підкисленому розчині натрію ортовольфрамату за присутності йонів барію(II). Питання хімії та хімічної технології / Voprosy Khimii i Khimicheskoi Tekhnologii. – 2022, No. 6. – P. 39-48. http://dx.doi.org/10.32434/0321-4095-2022-145-6-39-48

Марійчак О.Ю., Захарчук А.О., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Синтез лантан(III)-вмісних гетерополісполук із аніоном зі структурою Пікока-Уіклі з водно-органічних розчинів. Вісник Одеського національного університету. Хімія. 2022. Т. 27, № 3 (83). С. 63-75.

Zubov E.E. Crystal field and origin of exchange bias in compensated rare-earth ferrimagnets. Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 2022, 551, 169153.

Fita I., Puzniak R., Zubov E.E., Iwanowski P., Wisniewski A. Temperature-driven spin switching and exchange bias in the ErFeO3 ferrimagnet. Physical Review B. 2022, 105(9), 094424.

Пат. 150932. Спосіб визначення топологічно захищених крайових струмів у квантових матеріалах. Білоголовський М.О., Житлухіна О.С., Радіо С.В. (Україна) Заявка u2021 06446 від 15.11.2021, МПК (2021.01) H01L 39/06, дата публікації 11.05.2022, Бюл. № 19. – 5 с.

Oleksandra Yu. Mariichak, Anna O. Zaharchuk, Olena Yu. Popovska, Georgii M. Rozantsev, Serhii V. Radio SYNTHESIS AND CRYSTAL STRUCTURES OF Na9[Eu(W5O18)2]·35H2O WITH PLATE-LIKE MORPHOLOGY // Open Readings – 65th International Conference for Students of Physics and Natural Sciences. March 15–18, 2022. Abstract book. Vilnius, Vilnius University Press, LITHUANIA. – P.407. Режим доступа: http://www.openreadings.eu/wp-content/uploads/2022/03/Abstract_book_2022S.pdf

Велічко М.П., Дуванова Е.С., Книжник І.А., Лучко М.В., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Ізополівольфрамати купруму(II) в розчині при Z = 1,17; 1,25; 1,33: Методи добування та антимікробні властивості // Current chemical problems (CCP-2022): book of abstracts of the V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 22–24, 2022, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editorin-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2022. – P.

Літвак Л.В., Дуванова Е.С., Книжник І.А., Попова А.В., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Взаємодія катіонів Барію(II) з розчином ортовольфрамату натрію при Z = 1,17; 1,25; 1,33 // Current chemical problems (CCP-2022): book of abstracts of the V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 22–24, 2022, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editorin-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2022. – P. 46.

Лучко М.В., Книжник І.А., Попова А.В., Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Поліоксовольфрамати нікелю(II) у водно-ДМФА розчині при Z = 1,00 // Current chemical problems (CCP-2022): book of abstracts of the V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 22–24, 2022, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editorin-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2022. – P. 48.

Марійчак О.Ю., Розанцев Г.М., Радіо С.В. Солі лантанідів із аніоном паравольфрамата Б, [W12O40(OH)2]10– // Current chemical problems (CCP-2022): book of abstracts of the V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 22–24, 2022, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National

University; editorial board: O. M. Shendrik (editorin-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2022. – P. 52.

Олексій Ю.А., Радіо С.В., Гетьман Є.І. Прогнозування фазової стабільності твердих розчинів ортоарсенатів M1–xLnxAsO4 (M = Sc, La, Tb, Lu) // Current chemical problems (CCP-2022): book of abstracts of the V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 22–24, 2022, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editorin-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2022. – P. 55.

Рисіч А.В., Усачов О.М., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Синтез і кристалічна будова нової солі з аніоном зі структурою Андерсона–Еванса, [Ni(OH)6W6O18]4– // Current chemical problems (CCP-2022): book of abstracts of the V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 22–24, 2022, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editorin-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2022. – P. 56.

Щіпіна К.П., Лучко М.В., Книжник І.А., Попова А.В., Дуванова Е.С., Радіо С.В., Розанцев Г.М. Синтез паравольфрамату Б кадмію // Current chemical problems (CCP-2022): book of abstracts of the V International (XV Ukrainian) scientific conference for students and young scientists, March 22–24, 2022, Vinnytsia, Vasyl' Stus Donetsk National University; editorial board: O. M. Shendrik (editorin-chief) [et al.]. – Vinnytsia, 2022. – P. 60.

Ella Duvanova; Illia Krasnou; Ivan Knyzhnyk; Serhii Radio; Yevgen Karpichev. New antimicrobial Cu(II)-polyotungstate/polylactic acid films. Abstract of the Graduate school of functional materials and technologies 2022, 17th–18th May 2022, Tallinn, Estonia, P. 15. https://fmtdk.ut.ee/wp-content/uploads/2022/05/Conference-book-of-abstracts-2022.pdf

Get'man E.I., Oleksii Yu.A., Ardanova L.I., Radio S.V. Prediction of Substitution Limits and Thermodynamic Stability for Y1–xLnxF3 (Ln = Sm–Lu) Nanosized Materials // The International research and practice conference "Nanotechnology and nanomaterials" (NANO–2022). Abstract book. (25–27 August 2022, Lviv). – Kiev: LLC APF Polygraph Service, 2022. – P. 27.

Zubov E.E. Spin-reorientation phase transition and nonequilibrium thermodynamics of compensated ferrimagnet ErFeO3. The International research and practice conference "Nanotechnologies and Nanomaterials" NANO-2022. Book of Abstract. August 25-27, 2022, Lviv, Ukraine.

Get'man E.I., Mariichak O.Yu., Oleksii Yu.A., Ardanova L.I., Radio S.V. Predicting of thermodynamic stability of nanomaterials based on Gd1–xLnxF3, Ln = Sm–Lu, Y solid solutions // 2nd International Research and Practice Conference «Nanoobjects & Nanostructuring» (N&N□2022), September 26□28, 2022, Lviv, Ukraine: Proceedings // Ivan Franko National University of Lviv; Shevchenko Scientific Society. – Lviv: Research and Publishing Center of the Shevchenko Scientific Society, 2022. – P. 83-84.

Zhitlukhina E., Belogolovskii M., Gregor M., Radio S. Anion-Migration Memristive Nanodevices Based On Complex Copper Oxides // 2nd International Research and Practice Conference «Nanoobjects & Nanostructuring» (N&N□2022), September 26□28, 2022, Lviv, Ukraine: Proceedings // Ivan Franko National University of Lviv; Shevchenko Scientific Society. – Lviv: Research and Publishing Center of the Shevchenko Scientific Society, 2022. – P. 88-89.

Гетьман Є.І., Радіо С.В. Прогнозування термодинамічної стабільності та границь ізоморфних заміщень у високотемпературних надпровідниках La1–xLnxFeAsO1–y // Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (5 жовтня 2022 року). Матеріали конференції. – Житомир: Видавець ПП «Євро-Волинь, 2022. – С. 30-31.

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., 02.00.04)

Велічко Марина Петрівна

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

Дуванова Елла Сергіївна

Зубов Едуард Євгенович
(д. ф.-м. н.)

Книжник Іван Андрійович

Кордиш Олексій Миколайович

Марійчак Олександра Юріївна

Радіо Сергій Вікторович
(к. х. н., 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

