

Реєстраційна картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0122U000656

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-01-2022



II. Підстава для проведення робіт

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

У тому числі по роках:	
2022	1931.400 тис. грн.
2023	1991.470 тис. грн.
2024	2091.040 тис. грн.
2025	2300.140 тис. грн.
2026	2530.150 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 10844.200 тис. грн.	

III. 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, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

IV. 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

V. Відомості про співвиконавця ДіР

VI. 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.

Мета роботи українською:

Встановити вплив основно-кислотних та окисно-відновних процесів між оксидами металів та субоксидами елементів на характер наноструктурування продуктів реакції, а також зв'язок між хімічним складом, розміром часток, електронною будовою і оптичними властивостями іонів Cr³⁺, допованих у ортоборати складу MBO₃ (M = Sc, In, Lu) зі структурою кальциту. Виявити закономірності утворення супрамолекулярних комплексів «гість-хазяїн» біс(краун-етерів) і п-трет-бутилкалікс[4]аренів з органічними і неорганічними солями та факторів, які впливають на стійкість і селективність комплексів, що утворюються, для виявлення залежності «структура-властивість-функціональність». Розробка методів моделювання сумішей та наночастинок на основі неорганічних сполук, побудова адекватних QSAR/QSPR моделей для цих молекулярних ансамблей з метою прогнозування їх функціональних властивостей, виявлення закономірностей впливу складу та будови цих систем на властивості, що вивчаються.

Мета роботи англійською:

Establish influence of basic acid and redox processes between metal oxides and elements suboxides on nature of nanostructuring products of reaction, also relation between chemical composition, particle size, electronic structure and optical properties of Cr³⁺ ions doped in orthoborates of MBO₃ composition (M = Sc, In, Lu) with structure of calcite. Identify regularity of formation supramolecular complexes "guest-host" of bis(crown ethers) and p-tert-butylcalix[4]arenes with organic and inorganic salts and factors that affect on stability and selectivity of complexes are formed to identify dependence of "structure-property-functionality". Development of methods for modeling mixtures and nanoparticles based on inorganic compounds, construction of adequate QSAR/QSPR models for these molecular ensembles in order to predict their functional properties, identify regularity of influence the composition and structure of these systems on studied properties.

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво хімічних речовин і хімічної продукції

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Зінченко Віктор Федосійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Термодинамічна оцінка взаємодії у системах SiO-GeO₂ та ZnO-SiO (GeO). Розробка методів речовинного аналізу систем. Синтез легованих іонами Cr(III) ортоборатів зі структурою кальциту MBO₃ (M=Sc,In,Lu), дослідження фазового складу та морфології частинок отриманих матеріалів. Синтез нових біс(бензокраун-етерів) з фрагментом імідазолу. Вивчення закономірностей їх комплексоутворення з солями лужних і лужноземельних металів. Розробка системи дескрипторів на базі симплексного представлення будови неорганічних сполук для подальшого вирішення QSAR/QSPR завдань для різноманітних молекулярних ансамблей – сумішей сполук і наночастинок. Проведення модельних розрахунків.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

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

Номер етапу: 3

Назва етапу: Встановлення наноструктурування у системах SiO-GeO₂ та ZnO-SiO (GeO) методом РФА. Розрахунок параметрів кристалічного поля іонів Cr³⁺ в ортоборатах складу MBO₃ (M=Sc,In,Lu) за даними люмінесцентної спектроскопії. Синтез біс(бензоазакраун-етерів) з гнучкими спейсерами і дослідження їх комплексоутворення з солями аліфатичних діамінів. Виявити можливість одержання комплексів БМГЦ з s- і d-металами та дослідити їх спектрально-люмінесцентні властивості. Побудова та верифікація QSPR моделей для прогнозування властивостей плівкоутворюючих матеріалів. Проведення позаекспериментального скринінгу нових потенційних оптичних матеріалів.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 4

Назва етапу: Дослідження окисно-відновних реакцій у системах Eu₂O₃-SiO (GeO) спектроскопічними методами. Зіставлення отриманих експериментальних даних з результатами квантовохімічних розрахунків електронної будови MBO₃, легованих іонами Cr(III). Синтез біс-бензокраун-етерів), які містять в якості лінкерів фрагменти основ Трьогера, і вивчення їх комплексоутворення з солями органічних аміносполук. Дослідити можливість синтезу комплексів БМГЦ з f-металами та вивчити їх спектрально-люмінесцентні властивості. Побудова та верифікація QSAR/QSPR моделей для прогнозування властивостей наночастинок. Проведення позаекспериментального скринінгу властивостей нових наночастинок.

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 5

Назва етапу: Встановлення наноструктурування у системах Eu₂O₃-SiO (GeO) методом РФА. Узагальнення результатів дослідження впливу структурних та розмірних факторів на оптичні властивості іонів Cr³⁺ в ортоборатах складу MBO₃, аналіз перспектив практичного використання отриманих матеріалів. Синтез каліксаренів з краун-етерними замісниками по нижньому ободу і вивчення їх комплексоутворення з катіонами перехідних металів. Виявити основні закономірності зміни фотофізичних властивостей отриманих металокомплексів в залежності від природи металу. На основі інтерпретації відповідних QSAR/QSPR моделей виявити закономірності впливу складу та будови молекулярних ансамблів, що вивчаються, на їх різноманітні властивості.

Початок етапу: 01.2026

Закінчення етапу: 12.2026

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

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

ІХ. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

д. х. н., 05.14.06

**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**

Юрченко Т.А.

