Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0216U005734

Державний реєстраційний номер: 0115U003099

Відкрита

Дата реєстрації: 10-02-2016

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: РОЗРОБКА МЕТОДИК СИНТЕЗУ ТА АНАЛІЗУ МОДИФІКОВАНИХ МОНОМЕРІВ ЕПОКСИДНИХ СМОЛ ТА ЛАНТАНОЇДВМІСНИХ ПОЛІОКСОВОЛЬФРАМАТІВ

Початок етапу: 01-2015

Закінчення етапу: 12-2015

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070803

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: 21021, м.Вінниця, вул. 600-річчя, 21

Телефон: +38(063) 477-76-20

E-mail: rector@donnu.edu.ua

Інше: donnu.edu.ua

Інше:

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Донецький національний університет імені Василя Стуса

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070803

Адреса: вул. 600-річчя, 21, м. Вінниця, Вінницький р-н., Вінницька обл., 21021, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380432508930

E-mail: rector@donnu.edu.ua

WWW: http://www.donnu.edu.ua/

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 2201040

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 400.033 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

ОДЕРЖАННЯ МОДИФІКОВАНИХ МОНОМЕРІВ ДЛЯ ЕПОКСИДНИХ СМОЛ ТА ПОЛІОКСОВОЛЬФРАМАТІВ ДЛЯ СТВОРЕННЯ НОВІТНІХ МАТЕРІАЛІВ

Назва роботи (англ)

Obtaining of modified monomers for epoxy resins and polyoxotungstates for creating new materials

Реферат (укр)

Для розробки фундаментальних підходів до створення функціональних полімерних та композиційних матеріалів багатоцільового призначення встановлено: Розкриття оксиранового кільця відбувається в рамках як SN2, так і пограничного SN2 механізму. Регіоселективність ацидолізу заміщених оксиранів визначається як кислотно-основними властивостями, так і просторовою будовою реагентів і каталізаторів. Регіоселективність зростає в міру збільшення вкладу SN2 механізму. На початковій стадії процесу полімеризації комплекси амінів з трифторидом бору розпадаються під дією епоксидної смоли з вивільненням аміну і утворенням комплексу ЕД-20·BF3. Наявність у системі комплексів ЕД-20·BF3 сприяє протіканню двох потоків реакції: 1-го - каталізу BF3 гомополімеризації ЕД-20 і 2-го - затвердіння первинними і вторинними амінами або каталізу третинними амінами гомополімеризації, причому внесок кожного з потоків визначається природою аміну. У напрямі розробки методик синтезу лантанідвмісних поліоксовольфраматів та поліоксомолібдатів для створення новітніх матеріалів встановлено наступне: Розроблено умови синтезу Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O та Na9[Sm(W5O18)2]·30H2O з підкисленого до Z = 0.80 водного розчину з відношенням ?(Ln) : ?(W) = 1 : 10 дією ацетону. Методом ІЧ-спектроскопії показано належність аніону в синтезованих сполуках до структури Пікока-Уіклі. Розроблена в роботі методика одержання натрію декавольфрамолантанідатів (III) є новою та відрізняється тим, що дозволяє синтезувати середні солі, що може бути використано для синтезу інших середніх натрій гетерополідекавольфрамолантанідатів (III). Методом рентгенофазового аналізу встановлено, що продуктами термолізу Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O є натрій дивольфрамат Na2W2O7 та подвійний натрій-диспрозій ортовольфрамат Na0.5Dy0.5WO4. Методом скануючої електронної мікроскопії показано, що розмір зерен Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O знаходиться у межах 130 180 нм. Методом рентгенофазового аналізу встановлено, що продуктами термолізу Na9[Sm(W5O18)2]·30H2O є натрій дивольфрамат Na2W2O7 та подвійний натрій-самарій ортовольфрамат Na0.5Sm0.5WO4. Методом скануючої електронної мікроскопії показано, що розмір зерен Na9[Sm(W5O18)2]·30H2O знаходиться у межах 250 550 нм. Встановлено умови синтеза кислих солей із гетерополідекавольфрамосамарат (III)-аніоном зі структурою Пікока-Уіклі: Na7H2[Sm(W5O18)2]·24H2O (Z = 0.90), Na5H4[Sm(W5O18)2]·17H2O (Z = 1.00) та Na5H4[Sm(W5O18)2]·19H2O (Z = 1.10). ІЧ-спектроскопічним аналізом доведено належність гетерополіаніона в синтезованих солях до структури Пікока-Уіклі. Визначено, що Z = 1.10 є граничною кислотністю за якою можливе одержання солей із гетерополіаніоном зі структурою Пікока-Уіклі. За результатами хімічного та ІЧ-спектроскопічного аналізу встановлено, що за Z = 1.20 відбувається осадження подвійного натрію-самарію (III) гідрогептавольфрамату Na3.5Sm0.5H[W7O24]·13H2O. Методами хімічного аналізу та ІЧ-спектроскопії встановлено умови утворення диспрозій поліоксовольфраматів з підкислених водних розчинів натрію вольфрамату ? диспрозію гептавольфрамату Dy2W7O24?18H2O (Z = 1.17), диспрозію гідрогептавольфрамату Dy5[HW7O24]3?49H2O (Z = 1.29), подвійної солі натрію-диспрозію з лакунарним ундекавольфрамат-аніоном Na2Dy2[Dy2(H2O)10W22O72(OH)2]?34H2O (Z = 1.50). Вперше синтезовано диспрозію (III) паравольфрамат Б та самарію (III) паравольфрамат Б за обмінною реакцією лантаноїду (III) нітрату з натрій паравольфраматом Б та методом скануючої електронної мікроскопії доведено однофазність зразку та встановлено, що розмір зерен Dy10[W12O40(OH)2]3·100H2O знаходиться у межах 300 750 нм, а розмір зерен Sm10[W12O40(OH)2]3·104H2O знаходиться у межах 350 550 нм. Встановлено, що границі ізоморфних заміщень у ряду систем Nd5-xLaxMo3O16, Nd5-xCexMo3O16 та Nd5-xPrxMo3O16 у цілому зростають. Це обумовлено зменшенням різниці в радіусах тризарядних іонів від 0,051 ? у випадку заміщення Неодиму Лантаном до 0,017 ? у випадку заміщення Неодиму Празеодимом. Менша величина

границі заміщення в системі з Ce, у порівнянні з системою з La, обумовлена тим, що в ній відбувається не ізовалентне заміщення Nd3+ на Ce3+, а гетероваентне заміщення Nd3+ на Ce4+. Це істотно збільшує енергію змішування як за рахунок збільшення різниці в зарядах структурних одиниць, які заміщуються, так і їх розмірів (різниця радіусів іонів Nd3+ та Ce4+ дорівнює 0,139 ?). У всіх системах в областях твердих розчинів при збільшенні ступеня заміщення величини питомої електропровідності зростають. Проте, відбувається це за різних причин. У системах Nd5-xPrxMo3O16 та Nd5-xLaxMo3O16 при входженні у структуру катіонів із більшими іонними радіусами, ніж Nd3+, це відбувається внаслідок збільшення розмірів міжвузлій, за якими переміщуються аніони Оксигену. У системі Nd5-xCexMo3O16 в результаті гетеровалентного заміщення Nd3+ на Ce4+ стає більше аніонів Оксигену, які переміщуються. Отримані результати можуть бути корисними під час розробки нових твердих електролітів на основі Nd5-xLnxMo3O16 й подібних систем. У галузі розробки нових аналітичних методик концентрування, вилучення й визначення металів встановлено наступне: Запропоновано екстракційну систему ізопропіловий спирт-вода-амонію сульфат для вибіркового вилучення йодидного комплексу Бісмуту (III) та його спектрофотометричного визначення. Розроблено методику фотометричного визначення Бісмуту (III), яку перевірено методом "введено-знайдено" на модельному розчині, що містив Fe(III), Al(III), Ni(II), Co(II), Cr(III). Встановлено, що відносне стандартне відхилення не перевищує 0,03. Запропонована методика визначення Бісмуту (III) відрізняється простотою, застосуванням малонебезпечних, доступних екстрагентів.

Реферат (англ)

In order to develop fundamental approaches to the multi-purpose functional polymer and composite materials creation is established: Opening of the oxirane ring follows simultaneously SN2 and borderline SN2 mechanisms. The regioselectivity of the acidolysis of substituted oxiranes is determined by acid-base properties of the reactants and catalysts and steric factor. The regioselectivity increases as the contribution of the SN2 mechanism increases. It is shown the complexes are decomposed under the epoxy resin's action with amine releasing and formation new complex ED-20·BF3 at the initial polymerization stage. The presence of the last one promotes the two flows of reaction: the 1st - the catalysis of ED-20 homopolymerization by BF3 and the 2nd - curing ED-20 by primary and secondary amines or the catalysis of ED-20 homopolymerization by tertiary amines. The contribution of each flows depends on the amine nature. In order to develop new techniques for synthesis of lanthanide containing polyoxotungstates and polyoxomolybdates for further creation of new materials revealed the following. The conditions for the synthesis of a new Ln-containing heteropolytungstates Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O and Na9[Sm(W5O18)2]·30H2O from the aqueous solution, acidified to Z=?(H+)/?(WO42-)=0.80 with acetone adding, were determined. FTIR spectroscopy was used to show that the anion within the synthesized salt has a Peacock-Weakley structure. The method for obtaining sodium heteropoly decatungstolanthanidates (III), described in this research, is a new one and it allows to synthesize a neutral salt; in future this can be used in synthesis of neutral salts Na9[Ln(W5O18)2]·nH2O with other Ln-heteroatoms. X-ray analysis revealed that the thermolysis of Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O results in formation of Na2W2O7 and Na0.5Dy0.5WO4. Scanning electron microscopy confirmed the single-phaseness of the synthesized salt, and showed that the grain size of Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O is within 130-180 nm. X-ray analysis revealed that the thermolysis of Na9[Sm(W5O18)2]·30H2O results in formation of Na2W2O7 and Na0.5Sm0.5WO4. Scanning electron microscopy confirmed the single-phaseness of the synthesized salt, and showed that the grain size of Na9[Sm(W5O18)2]·30H2O is within 250-550 nm. The procedure of synthesis of the amorphous dysprosium and samarium paratungstates B using the exchange reaction from sodium paratungstate B were elaborated. The isolated salts were characterized by methods of chemical analyses, FTIR spectroscopy and X-ray diffraction. Scanning electron microscopy confirmed the single-phaseness of the synthesized salt, and showed that the grain size of Dy10[W12O40(OH)2]3·100H2O is within 300 750 nm, and that the grain size of Sm10[W12O40(OH)2]3·104H2O is within 250 550 nm. It is established that the limits of isomorphic substitutions in the range of systems Nd5-xLaxMo3O16, Nd5-xCexMo3O16 and Nd5-xPrxMo3O16 mainly increase. This is caused by decrease in differences for the radii of triply charged ions from 0.051 ? (in case of neodymium substitution with lanthanum) to 0.017 ? (in case of neodymium substitution with praseodymium). Lower value of the substitution limit in the system with Ce, compared to the La containing system, is explained by the fact that it is not isovalent substitution of Nd3+ with Ce3+, but a heterovalent substitution of Nd3+ with Ce4+, which takes place in the former one. This significantly increases the energy of mixing due to increasing differences in the charges of replaceable structural units and their increasing size (the difference between the radii of Nd3+ and Ce4+ is 0.139 ?). In the areas of solid solutions of all the systems, the values of specific conductivity increase as the degree of substitution increases. However, this occurs for different reasons. In the systems Nd5-xPrxMo3O16 and Nd5-xLaxMo3O16 as cations with larger ionic radii compared to Nd3+ enter the structure this occurs due to the increase in the size of interstices, along which the oxygen anions move. In the system Nd5-xCexMo3O16 the quantity of moving oxygen anions increases as a result of heterovalent substitution of Nd3+ with Ce4+. The results obtained can be applied for the development of new solid electrolytes based on Nd5-xLnxMo3O16 and the related systems. In order to develop of new analytical techniques of concentrating, extracting and determination of metal revealed follows. An extraction system "isopropyl alcohol-water-ammonium sulfate" for selective extraction of bismuth

(III) iodide complex and its spectrophotometric determination was proposed. A procedure for the photometric determination of bismuth (III), verified by the "put-found" on the model solution containing the Fe (III), Al (III), Ni (II), Co (II), Cr (III) were elaborated. It is found that the relative standard deviation does not exceed 0.03. The proposed technique for determination of bismuth is simple, using low-risk, affordable extractants.

Індекс УДК: 543, 547:541.127+542.61:546.87+546.786'664+546.05+543.427.34

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.19

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Методика синтезу диспрозій-вмісного гетерополівольфрамату Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O

Назва продукції (англ): Technique for synthesis of dysprosium-containing heteropoly tungstate Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O

Очікувані результати:

Галузь застосування: 72.1, 71.20, 21.20, 24.4, 19.20, 85.42

Опис продукції (укр): Розроблено умови синтезу Na9[Dy(W5O18)2]·30H2O з підкисленого до Z = 0.80 водного розчину з відношенням n(Dy):n(W) =1:10 висолюванням дією ацетону. Методом ІЧ-спектроскопії показано належність гетерополіаніону в синтезованій сполуці до структури Пікока-Уіклі. Розроблена в роботі методика одержання натрію декавольфрамодиспрозіату (III) є новою та відрізняється тим, що дозволяє синтезувати середню сіль, що може бути використано для синтезу інших середніх натрій гетерополідекавольфрамолантанідатів (III).

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: заплановано впровадити у навчальний процес вищої школи (ДонНУ)

Виробник продукції: кафедра аналітичної хімії ДонНУ

Споживачі продукції: підприємства з виготовлення люмінесцентних матеріалів для електронної техніки

Перспективні ринки: ринок освітніх та наукових послуг України та СНД, ринок люмінесцентних матеріалів

Права інтелектуальної власності: за законом належить автору та работодавцеві

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. Швед Е.Н., Беспалько Ю.Н., Синельникова М.А. Нуклеофильное раскрытие оксиранового цикла в присутствии органических оснований. Реакционная способность -Винница: ДонНУ, 2015. -141с. 2. Олійник М.М., Горічко М.В., Швед О.М., Сінельникова М.А., Беспалько Ю.М. Фізичні методи дослідження в хімії -Вінниця: ДонНУ, 2015. -150с. 3. Швед О.М., Сінельникова М.А., Беспалько Ю.М. Статична та динамічна стереохімія -Вінниця: ДонНУ, 2015. -185с. 4. Швед О.М., Беспалько Ю.М., Сінельникова М.А. Теорія електронних зміщень в органічних молекулах -Вінниця: ДонНУ, 2015. -56с. 5. E.I.Get'man, K.A.Chebyshev, L.V.Pasechnik, L.I.Ardanova, D.V.Korotina Crystal Structure and Electrical Conductivity of Nd5-xSmxMo3O16 Solid Solutions // Inorganic Materials. -2015. -Vol. 51, № 10. -P.1033-1038. 6. Get'man E.I., Chebyshev K.A., Ardanova L.I., Pasechnik L.V. Synthesis, Structure Refinement and Conductivity of Ln2-xCdxMoO6-x/2 // Solid State Phenomena. -2015. -Vol. 230. -P.45-50. 7. Poimanova O.Yu., Radio S.V., Bilousova K.Ye., Baumer V.N., Rozantsev G.M. Equilibria in the acidified aqueous-dimethylformamide solutions of tungstate-anion. Synthesis, crystal structure and characterization of novel decatungstate [Ba(H2O)2(C3H7NO)3]2[W10O32]?(C3H7NO)2 // Journal of Coordination Chemistry. -2015. -Vol.68, №1, -P.1-17. 8. Gumerova N.I., Kasyanova K.V., Rozantsev G.M., Baumer V.N., Radio S.V. Synthesis and crystal structure of potassium-nickel heteropoly hexatungstonickelate (II) K3Ni0,5[Ni(OH)6W6O18]?12H2O with Anderson-type anion and potassium-nickel paratungstate B K6Ni2[W12O40(OH)2]?22H2O // Journal of Cluster Science. ?2015. ?Vol.26, №4. -P. 1171-1186. 9. O.Yu. Poimanova, S.V. Radio, K.Ye. Bilousova, D.V. Khaustov, V.N.Baumer, G.M. Rozantsev Phase formation in the system Co2+ - WO42- - H+ - C3H7ON - H2O. Synthesis, crystal structure and characterization of cobalt(II) decatungstate [Co(C3H7NO)5]2[W10O32] // Journal of Coordination Chemistry. -2015. -Vol.68, №23, -P.4170-4183. 10. Mariichak O.Yu.,

Ivantsova E.S., Rozantsev G.M., Radio S.V. Thulium-Containing Heteropoly Tungstate With Peacock-Weakley Anion: Synthesis, Properties, And Surface Micromorphology // Вопр. химии и хим. технологии. -2015. -Т.3 (101). -С.38-44. 11. Свідоцтво авторського права на навчальний посібник "Статична та динамічна стереохімія" №63243. 12. Свідоцтво авторського права на навчальний посібник для самостійної роботи "Фізичні методи дослідження в хімії" №63244. 13. Бахалова Є. А. Оксірани як синтони в синтезі епоксидних сполук / Є. А. Бахалова, М. А. Сінельникова, О. М. Швед // Тези доп. VII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2015". - Харків, 2015. - С. 201. 14. Калинский А. М. Циклизация тиомочевин ряда 4-арил(гетарил)спинацеаминов / А.М. Калинский, Д.А. Ломов, М.Г. Абрамянц, О.М. Швед // Тези доп. VII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2015". -Харків, 2015. -С.213-214. 15. Пашкевич В.П. Изучение синтетического потенциала защищенных алкилпиперидонов-потенциальных объектов для drug-дизайна / В.П.Пашкевич, А.Р.Хайрулин // Тези доп. VII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання -2015". -Харків, 2015. -С.233. 16. Самойлова Э. С. Синтез гетероциклических соединений на основе диетил 4-оксопирроллидин-1,3-дикарбоксилата / Э.С.Самойлова, И.М.Серебряков, Н.С.Ситник // Тези доп. VII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2015". - Харків, 2015. - С. 240. 17. Поведінка третинних амінів у реакції ацетолізу хлорметилоксирану / С.Г.Бахтін, К.С.Ютілова, Ю.М.Беспалько, О.М.Швед // Тези доп. VII Всеукраїнської наукової конференції студентів та аспірантів "Хімічні Каразінські читання - 2015". -Харків, 2015. -С.259. 18. Брик Н.В. Кінетика реакції розкриття оксиранового циклу бензойною кислотою в присутності тетраетиламоній йодиду / Н.В. Брик, О.В. Малиш, Ю.М. Беспалько, О.М. Швед // Зб. наук. праць: XV наукова конференція "Львівські хімічні читання - 2015". - Львів, 2015. - С. У7. 19. Иванцова Э.С., Радио С.В. Синтез лантаноидсодержащих гетерополисоединений Na9[Ln(W5O18)2]?nH2O (Ln = Ce, Pr, Eu, Ho, Er) из подкисленных водных растворов вольфрамата натрия // XXV Менделеевская конференция молодых ученых: сборник тезисов (19-25 апреля 2015 г., Томск). -М.: Издательство "Национальное образование", 2015. -С.14. 20. Марийчак А.Ю., Иванцова Э.С., Розанцев Г.М., Радио С.В. Синтез гетерополисолей с анионом со структурой Пикока-Уикли [Ln(W5O18)2]n- (Ln = CeIII, CeIV, PrIII, SmIII, EuIII, DyIII, HoIII, ErIII, TmIII) // VII Міжнародна науково-технічна конференція студентів, аспірантівта молодих вчених "Хімія та сучасні технології" (27-29 квітня 2015р.). Том I: Неорганічна хімія, технологія неорганічних речовин та промислова екологія. - Дніпропетровськ: ВПК ДВНЗ "УДХТУ", 2015. -С.154-155.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 100

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Іванцова Елла Сергіївна

Беспалько Юлія Миколаївна

Гетьман Євген Іванович

Калінський Олександр Михайлович

Марійчак Олександра Юріївна

Мельниченко Василь Іванович

Радіо Сергій Вікторович

Ситник Наталя Сергіївна

Ютілова Ксенія Сергіївна

Яни Марія Валеріївна

Керівник організації:

Хаджинов Ілля Васильович

Керівники роботи:

Швед Олена Миколаївна (д. х. н., доц.)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.