

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U000837

Державний реєстраційний номер: 0120U102376

Відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2024



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Композити на основі допованих наноструктур TiO_2 і координаційних полімерів: синтез, будова, фазовий склад, морфологія та функціональні властивості

Початок етапу: 01-2020

Закінчення етапу: 12-2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут фізичної хімії ім. Л.В.Писаржевського НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417213

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: проспект Науки, 31, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

Телефон: 380445251190

E-mail: admini@inphyschem-nas.kiev.ua

WWW: <http://www.inphyschem-nas.kiev.ua/>

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417213

Адреса: проспект Науки, буд. 31, м. Київ, 03028, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445251190

E-mail: admini@inphyschem-nas.kiev.ua

WWW: <http://www.inphyschem-nas.kiev.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: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 13286.228 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Композити на основі допованих наноструктур TiO₂ і координаційних полімерів: синтез, будова, фазовий склад, морфологія та функціональні властивості

Назва роботи (англ)

Composites based on doped TiO₂ nanostructures and coordination polymers: synthesis, structure, phase composition, morphology and functional properties

Реферат (укр)

В результаті дослідження хімічного і фазового складу, морфології, текстурних характеристик цих матеріалів, їх фотокаталітичних і каталітичних властивостей, з'ясовано вплив природи прекурсорів неметалів, співвідношення (X) прекурсорів титану і неметалу, температури кальцинування (Тк) та інших умов їх одержання на ці чинники та їх фотокаталітичну (ФА) і каталітичну активність, виявлено прояви синергетичних ефектів. Виявлено залежності змін розмірів кристалітів анатазу, його відсотку в зразках, об'єму елементарної комірки, параметрів текстури, вмісту допантів від X і Тк. Встановлено якісний і кількісний вміст допантів, визначено їх стан і з'ясовано їх вплив на фотокаталітичну активність (FAVIS, FASolar) цих матеріалів в процесах фотоокиснення антибіотиків і барвників. Розроблено універсальний системний підхід до синтезу meso-nc-TiO₂ різної морфології. Досліджено структуро-спрямовуючий ефект азамacroциклічних катіонів Ni(II), Zn(II), та Cu(II) на формування йодидних кластерів Pb(II), Bi(III) Cd(II) в гібридних органо-неорганічних композитних перовскітах. На основі спектральних вимірювань для деяких сполук показано можливість розглядати їх як широкозонні напівпровідникові матеріали. На основі систематичного вивчення кристалічної будови координаційних полімерів, утворених сольватованими іонами Ni(II), Mn(II), Co(III), Cu(II), Zn(II), Cd(II) або азамacroциклічними катіонами Ni(II), Zn(II), Cu(II) з ароматичними кислотами, що містять гетероатоми азоту або сірки, встановлено основні типи міжмолекулярних взаємодій, які визначають особливості упаковки складових в кристалічних ґратках та розрахована їх пористість. Встановлено, що координаційним полімерам Zn(II) і Cd(II) притаманна фотолюмінесценція, яка виникає в результаті електронних переходів в містковому карбоксилатному ліганді. Отримано композити низки макроциклічних комплексів Zn(II) з органічними барвниками і встановлено, що параметри емісії барвників залежать від будови металокомплексної матриці.

Реферат (англ)

As a result, the chemical and phase composition, morphology, textural characteristics study of TiO₂, their photocatalytic and catalytic properties, the influence of the nature of non-metal precursors, the ratio (X) titanium and non-metal precursors, calcination temperature (Тк) and other production conditions on these factors and their photocatalytic (PA) and catalytic activity, the synergistic effects were revealed. The dependence of changes in the anatase crystallites size, dopant percentage in the samples, the unit cell volume, texture parameters, and the dopants content on X and Тк was revealed. The qualitative and quantitative content of dopants, their state was determined, and their influence on the photocatalytic activity (PAvis, PASolar) of these materials in the photooxidation processes of antibiotics and dyes was investigated. A universal system approach to the synthesis meso-nc-TiO₂ with various morphologies has been developed. The azamacrocyclic cations Ni(II), Zn(II), Cu(II) structure-directing effect on the Pb(II), Bi(III), Cd(II) iodide clusters formation in hybrid organic-inorganic composite perovskites was studied. Based on spectral measurements, the possibility of using such materials as wide-band semiconductor has been shown. Based on a systematic study of the crystal structure of formed solvated Ni(II), Mn(II), Co(III), Cu(II), Zn(II), Cd(II) ions or azamacrocyclic cations Ni(II), Zn(II), Cu(II) with nitrogen or sulfur contain aromatic acids, the main types of intermolecular interactions were determined, which affect the components packing features in the crystal lattices, and their porosity was calculated. It was found that Zn(II), Cd(II) coordination polymers are characterized by photoluminescence, which induced by electronic transitions in the bridging carboxylate ligand. Composites of macrocyclic Zn(II) complexes with organic dyes were obtained and established that the emission parameters of the dyes depend on the structure of the metal complex matrix.

Індекс УДК: 544, 546;54-386, 546, 546;54-386

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.15, 31.17, 31.17.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): фотокаталізатори на основі допованих неметалами наноструктури TiO₂

Назва продукції (англ): nonmetal doped TiO₂ nanostructures

Очікувані результати: Матеріали

Галузь застосування: хімічна промисловість

Опис продукції (укр): Доповані неметалами (C, N, F, S) наноструктури TiO₂, які здатні проявляти фотокаталітичну активність в процесах деградації органічних сполук при опроміненні світлом видимого діапазону

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

Стадія завершеності НТП: Дослідний зразок

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: дослідні виробництва ІФХ НАН України

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: Отримано патент

Форми та умови передачі продукції: Спільне виробництво

7. Бібліографічний опис

1. Романовская Н.И., Манорик П.А., Селищев А.В., Ермохина Н.И., Яремов П.С., Гребенников В.Н., Щербаков С.Н., Д.Р.Т.Цан/ Влияние модифицирования TiO₂ тиомочевинной на его фотокаталитическую активность в процессах деградации доксицилина. // Теорет. и эксперим. химия. – 2020. – 56(3). – С. 172-180. <https://doi.org/10.1007/s11237-020-09650-6>
2. Romanovska N.I., Manoryk P.A., Selyshchev O.V., Yaremov P.S., Shylzshenko O.V., Terebilenko A.V., Shcherbakov S. M., Zahn D.R.T. Influence of calcination temperature on structural-dimensional characteristics of C,S-doped TiO₂ nanostructures and their photocatalytic activity in the ceftazidime and doxycycline photodegradation processes. // Ukrainian Chemistry journal – 2020. – 86, №10. – С.95 – 119. doi: 10.33609/2708-129X.86.10.2020.95-119.
3. Grebennikov V.N., Leonenko E.A., Manorik P.A., Romanovska N.I., Kobylinska N.G., Shulzhenko A.V. The influence of super paramagnetic Fe₃O₄ nanoparticles on spectral and luminescent properties of mesostructured SiO₂/P123/Rh6G/Fe₃O₄ films formed in stationary magnetic fields // Ukrainian Chemistry journal, 2020, V. 86, No2- p.78-96. DOI: 10.33609/0041-6045.86.2.2020.78-96
4. Gavrish S.P., Shova S., Cazacu M., Dascalu M., Lampeka Ya. D. Syntheses and crystal structures of the one-dimensional coordination polymers formed by [Ni(cyclam)]²⁺ cations and 1,3-bis(3-carboxypropyl)-tetramethyldisiloxane anions in different degrees of deprotonation // Acta Crystallogr. Sect. E.- 2020.- V. E76, N3.- P.446-451. doi: 10.1107/S2056989020002327
5. Gavrish S.P., Shova S., Cazacu M., Lampeka Ya. D. A 2D coordination polymer assembled from a nickel(II) tetraazamacrocyclic cation and 4,4'-bis(dimethylsilanediyl)-dipthalate(3-) linker // Acta Crystallogr. Sect. C.- 2020. - V. C76, N5.- P.419-426. <https://doi.org/10.1107/S2053229620005008>
6. Gavrish S.P., Shova S., Cazacu M., Lampeka Ya. D. Crystal structure of the one-dimensional coordination polymer formed by the macrocyclic [Ni(cyclam)]²⁺ cation and the dianion of diphenylsilanediyl-bis(4-benzoic acid) // Acta Crystallogr. Sect. E.- 2020.- V. E76, N6.- P.929-932. doi: 10.1107/S2056989020006544

7. N. I. Ermokhina, V. V. Shvalagin, N. I. Romanovska, P. A. Manoryk, R. Yu. Barakov, M. O. Kompanets, V. I. Sapsay, D. O. Klymchuk, A. M. Puziy. Synthesis and characterization of different binary and ternary phasemixtures of mesoporous nanocrystalline titanium dioxide. // *SN Applied Sciences* 2021, 3:491 <https://doi.org/10.1007/s42452-021-04474-y>
8. Н.И.Романовская, П.А.Манорик, В.С.Воробец, Г.Я.Колбасов, Н.И.Ермохина, Я.В.Кишени, С.А.Сотник, П.С.Яремов, А.В.Полищук. Влияние условий синтеза на фотоэлектрохимические и электрокаталитические свойства TiO₂-наноструктур и TiO₂-Au-нанокмполитов // *Электронная обработка материалов*, - 2021.- 57(4), 1-14, <https://doi.org/10.52577/eom.2021.57.4.01>
9. L. V. Tsymbal, I. L. Andriichuk, S. Shova, D. Trzybiński, K. Woźniak, V. B. Arion, Ya. D. Lampeka Coordination polymers of the macrocyclic nickel(II) and copper(II) complexes with isomeric benzenedicarboxylates: the case of spatial complementarity between the bis-macrocyclic complexes and o-phthalate / *Cryst. Growth Des.*, - 2021. -V.21, N4, p. 2355-2370. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00011>
10. S. P. Gavrish, S. Shova, Ya. D. Lampeka Crystal structures of Zn(cyclam)I₂ (second monoclinic polymorph) and Zn(cyclam)I(13) // *Acta Crystallogr. Sect. E*, E77, - 2021 - P.1185-1189. <https://doi.org/10.1107/S2056989021011166>
11. Romanovska N.I., Manoryk P.A., Yaremov P.S., Byeda O.A., Pershina K.D., Kazdobin K.A. Direct changing of structural, morphological and Electrochemical Properties of the Sulfur-doped nano TiO₂ // *Materials Today: Proceedings*. - 2022. - V50, Part 4. - P. 435-441. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2021.11.246>
12. Романовська Н.І., Гребенніков В.М., Шульженко О.В., Яремов П.С., Селищев О.В., Цан Д.Р.Т., Манорик П.А. Вплив умов отримання C,N,F-TiO₂ наноструктур на їх фотокаталітичну активність в процесі фотодеградації доксицикліну. // *Теорет. та експерим. хімія*. - 2022. - 58, №1. - С.35 - 41. <https://doi.org/10.1007/s11237-022-09720-x>
13. Ermokhina N., Korzhak A., Klymchuk D., Puziy A., Grebennikov V., Romanovska N., Shulzhenko O., Manorik P. Photocatalytic activity of mesoporous TiO₂ (anatase) in the reaction of hydrogen release from aqueous-ethanolic mixture // *Ukrainian Chemistry Journal*. - 2022. - 88, №4. - P. 94-112. <https://doi.org/10.3103/S1068375522010094>
14. S. P. Gavrish, S. Shova, Ya. D. Lampeka Crystal structure of poly[(μ₆-benzene-1,3,5-tricarboxylato)tris(1-methylpyrrolidin-2-one)nitratodizinc(II)] / *Acta Crystallogr. Sect. E*, 2022, v. E78, N12, p.1253-1256. <https://doi.org/10.1107/S2056989022011045>
15. S. P. Gavrish, S. Shova, Ya. D. Lampeka Syntheses and structural characterizations of the first coordination polymers assembled from the Ni(cyclam)²⁺ cation and the benzene-1,3,5-tricarboxylate linker / *Acta Crystallogr. Sect. E*, 2022, v. E78, N11, p. 1122-1126. <https://doi.org/10.1107/S2056989022009860>
16. L. V. Tsymbal, V. B. Arion, Ya. D. Lampeka Synthesis and crystal structure of trans-diaqua-(1,4,8,11-tetraazaundecane)copper(II) isophthalate monohydrate / *Acta Crystallogr. Sect. E*, 2022, v. E78, N8, p. 851-854. <https://doi.org/10.1107/S2056989022007538>
17. L. V. Tsymbal, R. Ardeleanu, S. Shova, Ya. D. Lampeka Synthesis and crystal structure of bis[transdiaqua(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane-μ₄N1,N4,N8,N11)nickel(II)] trans-(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane-μ₄N1,N4,N8,N11)bis[4,4',4''-(1,3,5-trimethylbenzene-2,4,6-triyl)tris(hydrogen phenylphosphonato)]nickel(II) decahydrate / *Acta Crystallogr. Sect. E*, 2022, v. E78, N7, p. 750-754. <https://doi.org/10.1107/S2056989022006624>
18. L. V. Tsymbal, I. L. Andriichuk, V. Lozan, S. Shova, Ya. D. Lampeka Synthesis and crystal structure of diaqua(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane)zinc(II) bis(hydrogen 4-phosphonatobiphenyl-4-μ-carboxylato)(1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane)zinc(II) / *Acta Crystallogr. Sect. E*, 2022, v. E78, N6, p. 625-628. <https://doi.org/10.1107/S2056989022004534>
19. R. I. Gurtovyi, S. P. Gavrish, L. V. Tsymbal, M.-O. Apostu, M. Cazacu, S. Shova, Ya. D. Lampeka 2D coordination polymers and ionic complexes of the nickel(II) and zinc(II) cyclam cations with trigonal carboxylate linkers based on triazine core. Crystal structures, supramolecular catenation and spectral characterization / *Polyhedron*, 2022, v.221, 115870 (12 p.p.). <https://doi.org/10.1016/j.poly.2022.115870>
20. L. Andriichuk, S. Shova, Ya. D. Lampeka Crystal structures of the complexes containing macrocyclic cations [M(cyclam)]²⁺ (M = Ni, Zn) and tetraiodidocadmate(2-) anion / *Acta Crystallogr. Sect. E*, 2023, v. E79, N9, p.821-826. <https://doi.org/10.1107/S2056989023007004>
21. Lishchenko, Y.L., Sotnik, S.O., Volochnyuk, D.M. et al. Catalytic reactions of epoxides and aziridines with carbon dioxide in the

22. Романовська Н.І., Гребенніков В.М., Шульженко О.В., Яремов П.С., Коржак А.В., Манорик П.А., Кучмій С.Я. Вплив кислотності поверхні кодопованих C,S-TiO₂ наноструктур на їх фотокаталітичні властивості в процесах виділення водню і окиснення етанолу. // Теорет. і експер. хімія. – 2023. 60, 4.С. 227–233.

23. Трипольський А.І., Єрмохіна Н.І., Гребенніков В.М., Климчук Д.О., Космамбетова Г.Р., Діденко О.З., Манорик П.А. Вплив структури поверхні нанокристалітів діоксиду титану на їх каталітичні властивості в реакції перетворення спиртів // Теорет. і експер. хімія. – 2023. 60, 4.С. 240–246.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 313

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Єрмохіна Наталія Іванівна (к. х. н.)

Андрійчук Ірина Леонідівна (к. х. н.)

Гавриш Сергій Павлович (к. х. н.)

Гребенніков Володимир Миколайович (к. х. н.)

Лампека Ярослав Дмитрович (д.х.н., чл-кор.НАН України)

Романовська Наталія Іванівна (к.х.н.)

Сотнік Світлана Олександрівна (к.х.н.)

Тверсков Олександр Юрійович

Цимбал Людмила Володимирівна (к. х. н., с.н.с.)

Шульженко Олександр Васильович

Керівник організації:

Кошечко Вячеслав Григорович (д. х. н., професор, акад.)

Керівники роботи:

Манорик Петро Андрійович (д. х. н., с.н.с.)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.