

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U032895

Державний реєстраційний номер: 0124U004748

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Етап предорганізації

Початок етапу: 08.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380573409343, 380573409339

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 4993.920

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка нових матеріалів медико-біологічного та ветеринарного призначення на основі супрамолекулярних систем

Назва роботи англійською:

Development of new materials based on supramolecular systems for biomedical and veterinary applications

Реферат українською:

Проект спрямований на задоволення потреб ринку діагностичних технологій і вирішення актуальних проблем ветеринарії, пов'язаних із низькою біодоступністю та швидким вивільненням активних речовин. Головною метою проекту є розроблення нових матеріалів медико-біологічного та ветеринарного призначення на основі супрамолекулярних систем типу «хазяїн-гість», ротаксанового і псевдоротаксанового типу, а також інших топологій з використанням як рецепторів кукурбітурилів, циклодекстринів та їх модифікованих аналогів. У ході першого етапу проекту було синтезовано супрамолекулярні системи на основі похідних триазоловмісних карбонових кислот та кукурбітурилів із розміром циклу 6 та 7. Утворення комплексів було підтверджено за допомогою термогравіметричного аналізу, диференціальної сканувальної калориметрії та сканувальної електронної мікроскопії. Структурні особливості та енергії комплексоутворення супрамолекулярних систем було досліджено квантово-хімічними методами і молекулярною динамікою і показано, що для трьох кукурбітурилів (з розміром 6, 7 і 8) найстабільнішою структурою є та, де гетероциклічні кислоти входять у порожнину хазяїна тіооцетовим фрагментом. На основі дослідження спектральних та фотофізичних характеристик одержаних флуоресцентних сполук різних класів встановлено, що найбільш перспективними для створення ротаксанових систем є акридиновий оранжевий та його димери, поліметинові, стирилові та трифенілпіразолінові барвники. Синтезовано сквараїн-ротаксани, що містять як незаміщені, так і фторовані фрагменти у макроциклі. Інкапсуляція сквараїнового барвника у макроцикл, дозволяє збільшити фотостабільність та квантові виходи. Виконання проекту передбачає розробку нової інфраструктурної одиниці зі створенням центру колективного користування науковими приладами, що сприятиме подальшому розвитку супрамолекулярної хімії в Україні. За звітний період було проведено закупівлю та інсталяцію лабораторної сублімаційної сушарки (ліофілізатору).

Реферат англійською:

The project aims to address the needs of the diagnostic technology market and resolve current challenges in veterinary medicine related to low bioavailability and rapid release of active substances. The primary goal of the project is to develop new biomedical and veterinary materials based on supramolecular systems of the "host-guest" type, rotaxane and pseudorotaxane types, and other topologies using cucurbiturils, cyclodextrins, and their modified analogs as receptors. During the first phase of the project, supramolecular systems based on triazole-containing carboxylic acid derivatives and cucurbiturils with ring sizes of 6 and 7 were synthesized. The formation of complexes was confirmed using thermogravimetric analysis, differential scanning calorimetry, and scanning electron microscopy. The structural features and binding energies of the supramolecular systems were studied using quantum-chemical methods and molecular dynamics. It was demonstrated that, for three cucurbiturils (sizes 6, 7, and 8), the most stable structure involved heterocyclic acids entering the host cavity via their thioacetic fragment. Based on the study of the spectral and photophysical properties of various fluorescent compounds, it was established that the most promising dyes for creating rotaxane systems include acridine orange and its dimers, polymethine, styryl, and triphenylpyrazoline dyes. Squaraine rotaxanes containing both unsubstituted and fluorinated fragments in the macrocycle were synthesized. Encapsulation of the squaraine dye within the macrocycle enhances its photostability and quantum yields. The project involves establishing a new infrastructure unit with the creation of a center for the collective use of scientific instruments, contributing to the further

development of supramolecular chemistry in Ukraine. During the reporting period, a freeze dryer (lyophilizer) was procured and installed.

Індекс УДК: 547, 547, [544.185:547:632.95.026.1]+634.1.076

Коди тематичних рубрик: 31.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Чебанов Валентин Анатолійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, член-кор. НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Проміжний звіт (анотований звіт) про виконану роботу в рамках реалізації проекту з виконання наукових досліджень і розробок «Розробка нових матеріалів медико-біологічного та ветеринарного призначення на основі супрамолекулярних систем»

Назва НТП англійською: Interim report (annotated report) on the work performed within the framework of the implementation of the scientific research and development project "Development of new materials based on supramolecular systems for biomedical and veterinary applications"

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: Практичне застосування у фармації, медицині, каталізі, електроніці, агропромисловості та ін.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проміжний звіт, що містить інформацію про результати та стан виконання проекту, копії опублікованих тез доповідей та іншої друкованої наукової продукції

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

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:

IX. Бібліографічний опис

1. Свояков Р.П., Колосова О.С., Кулик О.Г., Обухова О.М., Ермоленко І.Г., Татарець А.Л. Синтез флуоресцентних сквараїн-ротаксанових барвників та їхнє дослідження у ДНК-матрицях. — XXVI Українська

конференція з органічної та біоорганічної хімії, 16-20 вересня 2024 р., Ужгород, Україна, Сп48.

2. Гончаров В.О., Сахно Я.І., Чебанов В.А. ТанDEMна комбінація реакцій Угі/аза Віттіга за участю п-кетоглутарової кислоти. — XXVI Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії, 16-20 вересня 2024 р., Ужгород, Україна, Сп60.

3. Miasnikova D., Kyrychenko A., Pinchukova N., Vashchenko O., Mateychenko P., Chebanov V. Theoretical and Experimental Study of the Supramolecular Complexes of Cucurbit[n]urils with Triazolyl Thioacetic Acid Derivatives. — 3rd International Research and Practice Conference "Nanoobjects & Nanostructuring" (N&N-2024), 7-10 October 2024, Lviv, Ukraine, P. 7-8.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Семиноженко Володимир Петрович
д.ф.-м.н., 01.04.07

Перелік осіб-виконавців

Збруєв Олександр Ігорович
(к. х. н.)

Колосова Ольга Сергіївна
(к. х. н.)

Кулик Олеся Геннадіївна
(к. х. н., 02.00.03)

Мяснікова Дар'я Юріївна
(аспірант)

Пінчукова Наталія Олександрівна
(к.т.н., 05.17.04)

Сахно Яна Ігорівна
(к. х. н.)

Свояков Ростислав Петрович
(аспірант)

Чебанов Валентин Анатолійович
(д.х.н., член-кор.НАН України, 02.00.03)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Федоренко Т.Ю.

Телефон

+38 (057) 341-04-98

Реєстратор

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

