Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001940

Державний реєстраційний номер: 0119U002532

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Фундаментальні засади керування фізико-хімічними та експлуатаційними властивостями мікро- та наноструктур: теоретичне прогнозування та експериментальне вивчення.

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380577051247

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.): 1504.699

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фундаментальні засади керування фізико-хімічними та експлуатаційними властивостями мікро- та наноструктур: теоретичне прогнозування та експериментальне вивчення.

Назва роботи англійською:

Fundamentals of governing physic-chemical and operational properties of micro- and nanostructures: theoretical prognostication and experimental study.

Реферат українською:

Мета роботи. Оптимізувати метод синтезу естерів нітрофлуоресцеїнів, вивчити їх спектри поглинання та кислотно-основні властивості в органічних та міцелярних розчинах. Охарактеризувати основні колоїдні властивості суспензій та золів нановуглецевих структур, а саме, фуллеренів та одностінних вуглецевих нанотрубок. Розробити електрохімічні сенсори для вольтамперометричного визначення естрогенних стероїдних гормонів. Дослідити закономірності та відмінні риси функціонування динамічних нанесених нанокаталізаторів із самоорганізованою конфігурацією каталітичних центрів у разі їх випадкового розташування. Побудувати моделі QSAR для опису pKa широкого класу органічних сполук. Розробити комплекс комп'ютерних програм для побудови класифікаційних функцій активності на основі L1-регуляризації. Оптимізація умов створення та експлуатації сонячних елементів, сенсибілізованих органічними барвниками, прогнозування фізико-хімічних властивостей гібридних органо-неорганічних наноматеріалів. Методи. Спектрофотометрія, динамічне розсіювання світла, вольтамперометрія, кінетичний метод Монте Карло, метод випадкових мозаїк, QSAR, методи квантової хімії, фотоіндуковане перенесення електрону із барвника до напівпровідника у розчинах, вплив середовища на конформаційну динаміку в системі барвник-TiO2, електронні спектри поглинання органічних барвників, хемометричні моделі “структура-активність”, класичне молекулярно-динамічне (МД) моделювання, квантово-хімічні розрахунки, методи QSAR. Одержані результати і новизна. Розроблено ефективний метод синтезу низки флуоресцеїнових сполук та ідентифіковано продукти побічних реакцій. Інтерпретовано характер протолітичної рівноваги нітрофлуоресцеїнів у новому розробленому нами бінарному розчиннику «ацетонітрил + 4 мас % ДМСО». На основі даних про уявні константи дисоціації 22 флуоресцеїнових барвників в міцелярних розчинах запропоновано класифікацію цих сполук за характером тавтомерії аніонів та послідовністю дисоціації функціональних груп. На прикладі ф

Реферат англійською:

Aim of the work – To optimize the method of synthesis of nitrofluorescein esters, to study their absorption spectra and acid-base properties in organic and micellar solutions. Describe the main colloidal properties of suspensions and sols of nanocarbon structures, namely, fullerenes and single-walled carbon nanotubes. Develop electrochemical sensors for voltammetric determination of estrogenic steroid hormones. Investigate the regularities and distinctive features of the functioning of dynamic deposited nanocatalysts with self-organized configuration of catalytic centers in the case of their random location. Build QSAR models to describe pKa of a wide class of organic compounds. Develop a set of computer programs for constructing classification functions of activity based on L1- 5 regularization. Optimization of conditions for the creation and operation of solar cells sensitized to organic dyes, forecasting the physical and chemical properties of hybrid organo-inorganic nanomaterials. Methods – spectrophotometry, NMR spectroscopy, dynamic light scattering, L 1 -regularization, coupled clusters theory; kinetic Monte Carlo method; classical molecular-dynamic (MD) simulation; non-empirical (ab initio) MD modeling and quantum-chemical calculations; methods of spectrophotometry in the UV region and IR region of the spectrum, liquid chromatography. Photoinduced electron transfer from dye to semiconductor in solutions, influence of medium on conformational dynamics in dye-TiO2 system, electronic absorption spectra of

organic dyes, chemometric “structure-activity” models, classical molecular- dynamic (MD) modeling, quantum chemical calculations, methods QSAR. Obtained results and novelty – An effective method for the synthesis of a number of fluorescein compounds has been developed and the products of adverse reactions have been identified. The nature of the protolytic equilibrium of nitrofluoresceins in the new binary solvent "acetonitrile + 4 wt% DMSO" develop

Індекс УДК: 544, 544.354+544.77.022.532

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Мчедлов-Петросян Микола Отарович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Розроблено ефективний метод синтезу низки флуоресцеїнових сполук та ідентифіковано продукти побічних реакцій.

Назва НТП англійською: An effective method for the synthesis of a number of fluorescein compounds has been developed and the products of adverse reactions have been identified.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Інтерпретовано характер протолітичної рівноваги нітрофлуоресцеїнів у новому розробленому нами бінарному розчиннику «ацетонітрил + 4 мас % ДМСО». На основі даних про уявні константи дисоціації 22 флуоресцеїнових барвників в міцелярних розчинах запропоновано класифікацію цих сполук за характером тавтомерії аніонів та послідовністю дисоціації функціональних груп. На прикладі фталеїнових барвників проілюстровано можливість регулювання хімічних рівноваг у розчинах за допомогою циклодекстринів.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Shekhovtsov S.V., Shvets E.H., Kolosov M.A., Omelchenko I.V., Batrak A.S., Mchedlov-Petrossyan N.O. Peculiarities of the 4,5-dinitrofluorescein esters synthesis: Formation of reduced species. Coloration Technology. 2021. https://doi.org/10.1111/cote.12582.

2. Mchedlov-Petrossyan N.O., Vodolazkaya N.A. Protolytic equilibria in organized solutions: ionization and tautomerism of fluorescein dyes and related indicators in cetyltrimethylammonium chloride micellar solutions at high ionic strength of the bulk phase. Liquids. 2021, 1, 1-24.

3. Moskaeva E.G., Mosharenkova A.V., Shekhovtsov S.V., Mchedlov- Petrossyan N.O. Protolytic equilibrium of tetra- and pentanitrofluoresceins in a binary solvent acetonitrile – dimethyl sulfoxide (mass ratio 96 : 4). Ukrainian Chem J. 2021, 87(5), 25-37.

4. Laguta A.N., Mchedlov-Petrossyan N.O., Bogatyrenko S.I., Kovalenko S.M., Bunyatyan N.D., Trostianko P.V., Karbivskii V.L., Filatov D.Yu. Interaction of aqueous suspensions of single-walled oxidized carbon nanotubes with inorganic and organic electrolytes. J. Mol. Liquids. 2022, 347, 117948.

5. Marfunin M.O., Klochkov V.K., Radionov P.M, Mchedlov-Petrossyan N.O. Hydrosol of C70 fullerene: synthesis and stability in electrolytic solutions. Ukrainian Chem. J. 2021, 87(10), 63-73.

6. Mchedlov-Petrossyan N.O., Marfunin M.O. Formation, Stability, and Coagulation of Fullerene Organosols: C 70 in Acetonitrile–Toluene Solutions and Related Systems. Langmuir. 2021, 37(23), 7156-7166.

7. Kriklya N.N., Gromovoy T.Y., Mchedlov-Petrossyan N.O. 4,5- Dinitrosulfonefluorescein and related dyes: Kinetics of reversible rupture of the pyran ring and their interaction with lysozyme. Coloration Technol. 2021;00, 1–10.

. Tkachenko O., da Rosa D.S., Virgili A.H., Costa T.M.H.; Vasconcellos M.A.Z., Arenas L.T., Deon M., Benvenutti E.V., de Menezes E.W. 2Magnetic and Mesoporous Silica-Niobia Material as Modifier of Carbon Paste Electrode for p-Nitrophenol Electrochemical Determination. Journal of the Brazilian Chemical Society. 2021, 32, 609-617.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович
д. ф.-м. н., 01.04.03, 03.00.02

Перелік осіб-виконавців

Іванов Володимир Венедиктович
(к.х.н., 02.00.04)

Гога Сергій Тарасович
(к. х. н.)

Калугін Олег Миколайович
(к.х.н., 02.00.04)

Кириченко Олександр Васильович
(д. х. н., 07.00.02)

Коваленко Сергій Миколайович
(д.х.н., 02.00.03)

Колесник Ярослав Валентинович
(к. х. н.)

Коробов Олександр Ісаакович
(д. х. н., 02.00.04)

Мчедлов-Петросян Микола Отарович
(д.х.н., 02.00.04)

Христенко Інна Василівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Собран Н.В.

Телефон

+38 (066) 803-49-28

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

