

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U004101

Державний реєстраційний номер: 0107U006880

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-02-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження впливу низькомолекулярних компонент на структуру та функції водних, біомолекулярних та нанорозмірних систем

Початок етапу: 01.2008

Закінчення етапу: 12.2012

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова Національної Академії Наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 521-34-23, 526-59-98

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594, 380442343243

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1863.69
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження впливу низькомолекулярних компонент на структуру та функції водних, біомолекулярних та нанорозмірних систем

Назва роботи англійською:

Research into the influence of low-molecular components upon the structure and function of water, biomolecular and nanosize systems

Реферат українською:

Розвинуто теорію функціонала густини та її застосувань для розрахунку структурних та енергетичних характеристик широкого класу багатоелектронних молекулярних систем. Розроблені статистичні методи аналізу реакцій поодиноких біомолекул. Досліджено спін-орієнтаційні фазові переходи у гібридних наносистемах "ферромагнетик-надпровідник".

Реферат англійською:

The density functional theory and its applications to calculations of the structural and energy characteristics of a wide class of many-electron molecular systems are advanced. Statistical methods of the analysis of single biomolecule reactions are developed. The spin-orientation phase transitions in hybrid ferromagnet-superconductor nanosystems are investigated.

Індекс УДК: 537.86;621.38.01:53, 537.311; 530.199

Коди тематичних рубрик: 29.35

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Христофоров Леонід Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи дослідження впливу низькомолекулярних компонент на структуру та функції водних, біомолекулярних та нанорозмірних систем

Назва НТП англійською: Methods of research into the influence of low-molecular components upon the structure and function of water, biomolecular and nanosize systems

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розвинуто теорію функціонала густини та її застосувань для розрахунку структурних та енергетичних характеристик широкого класу багатоелектронних молекулярних систем. Розроблені статистичні методи аналізу реакцій поодиноких біомолекул. Досліджено спін-орієнтаційні фазові переходи у гібридних наносистемах "ферромагнетик-надпровідник".

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.08-12.12

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова Національної Академії Наук України

Перспективні ринки: Україна

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

V.Ya. Antonchenko and E.S. Kryachko. Interaction of Uranyl Ion with Few Molecules of Water: Thought (Computational) Scenarios with Hydrogen Bonding Motif. One Short Festschrift Story. Theor. Chem. Acc. 120, 421-428 (2008); E.S. Kryachko and F. Remacle. Implementation of Simple Logic Gates on Gold-Ammonia Bonding

Patterns in Different Charge States. *Mol. Phys.* 106, 521-530 (2008); E.S. Kryachko. Where Gold Meets a Hydrogen Bond? *J. Mol. Struct.* 880, 23-30 (2008); E.S. Kryachko. The Force Field Picture of Molecular Shape Response. *Int. J. Quantum Chem.* 108, 1930-1938 (2008); E.S. Kryachko. Interaction of Gold Atom with Clusters of Water: Few Computational Mise-En-Scenes with Hydrogen Bonding Motif. *Coll. Czech. Chem. Commun.* 73, 1457-1474 (2008); H. Nagao, S. Kruchinin. Kondo effect coupled to superconductivity ultrasmall grains. *Proc. NATO ARW "Electron transport in nanosystems"* (ed. by J. Bonca and S. Kruchinin). Springer (2008) 105-115; V. Ermakov, S. Kruchinin, A. Fujiwara. Electronic nanosensors based nanotransistor with bistability behaviour. *Proc. NATO ARW "Electron transport in nanosystems"* (ed. by J. Bonca and S. Kruchinin). Springer (2008) P.341-349; Electron transport in nanosystems (J. Bonca and S. Kruchinin, eds.). *Proc. NATO ARW*, Springer (2008) 420p; S.P. Kruchinin, V. Novikov, N.N. Bogolyubov Jr. Self-organization and nonequilibrium structures in phase space. *Int. J. Mod. Phys.* 22 (2008) 2025-2045; Kruchinin S., Novikov V., Klepikov V. Nonlinear current oscillations in a Josephson junction with fractal radioisotope composite. *Metrology and Measurement Systems*, 15 (2008) 281-287; Kruchinin S., Ermakov V. Thermoelectricity phenomena in molecular junction. *Proc. NATO ARW "Physical properties of nanosystems"* (ed. by J. Bonca and S. Kruchinin). Springer (2008) 340-348; Physical properties of nanosystems (J. Bonca and S. Kruchinin, eds.). *Proc. NATO ARW*, Springer (2008) 405p; Yu.M. Barabash, L.N. Christophorov, M.V. Olenchuk, V.N. Kharkyanen. Light propagation through solutions of molecules with long-lived photoexcited states. *Abstr. 4th Intl. Conf. "Physics of Liquid Matter: Modern Problems"*, Kiev, Ukraine (2008) 191; L.N. Christophorov, V.N. Kharkyanen. Structural regulation of biochemical reactions: Synergetic mechanisms. *Abstr. NATO ARW "Molecular Self-Organization in Micro-, Nano- and Macro-dimensions: from Molecules to Water, Nanoparticles, DNA and Proteins"*, Kiev, Ukraine (2008) 23; Болеста І.М., Глосковська Н.В., Панасюк М.Р., Ярицька Л.І. Про температурну залежність фотопровідності шаруватих кристалів йодистого кадмію. *УФЖ* 53 (2008) 162-166; Antonchenko V., Gloskovskaya N., Ilyin V. Compressibility "maps" of 1D square-well fluid. *Abst. 4th Int. Conf. "Nanoscale Liquid Systems"*, Kyiv (2008) 25; Болеста І.М., Глосковська Н.В., Панасюк М.Р., Ярицька Л.І. Вплив мембранних коливань шаруватої кристалічної ґратки на фотопровідність кристалів йодистого кадмію. *Міжрегіональний науковий семінар "Сучасні проблеми електроніки"*, Тези доповідей, Львів (2008) 8; L.N. Christophorov. Self-organization effects in reactions of macromolecules. *Int. J. Quant. Chem.* 110 (2009) 62-66; Yu. Dzhezherya, S.P. Kruchinin. Spin-orientation phase transitions of the system of magnetic dots in a London superconductors. *Proc. Int. Conf. "New in magnetism and magnetic materials, Moscow"* (2009) 652-654; E.S. Kryachko. Gold in Hydrogen Bonding Motif – Fragments of Essay. Demonstration of Nonconventional Hydrogen Bonding Patterns Between Gold and Clusters of Conventional Proton Donors. In: N. Russo, V.Ya. Antonchenko, and E.S. Kryachko (Eds.), *Proc. NATO ARW "Molecular Self-Organization in Micro-, Nano-, and Macro-Dimensions: From Molecules to Water, to Nanoparticles, DNA and Proteins"*, Springer (2009) 315-334; E.S. Kryachko. Nonconventional Hydrogen Bonding and Vertical Electron Detachment in Anionic Complexes of Gold with DNA Bases: Few Essayistic Fragments. *Polish J. Chem. A.* 83 (2009) 917-931; E.S. Kryachko. To Nano-Biochemistry: Picture of Interactions of DNA with Gold. In: C. Matta (Ed.), *Quantum Biochemistry*. Wiley-VCH, Weinheim (2009) 245-306; E.S. Kryachko. Few Sketches on Connections Between the Riccati and Ermakov-Milne-Pinney Equations. *Int. J. Quantum Chem.* 109 (2009) 2897-2902; A. Karpfen and E.S. Kryachko. On the Intramolecular Origin of the Blue Shift of A-H Stretching Frequencies: Triatomic Hydrides HAX. *J. Phys. Chem. A* 113 (2009) 5217-5223; Antonchenko V., Gloskovskaya N., Ilyin V. Square-well fluids *Abstr. 3rd Conf. "Statistical Physics: Modern Trends and Applications"*, Lviv (2009) 142; V.N. Kharkyanen, Yu.M. Barabash, N.M. Berezetskaya, M.V. Olenchuk, P.P. Knox, L.N. Christophorov. Deceleration of the electron transfer reaction in the photosynthetic reaction centre as a manifestation of its structure fluctuations. *Biopolymers & Cell* 26 (2010) 286-294; Kharkyanen V.N., Barabash Yu.M., Berezetskaya N.M., Olenchuk M.V., Christophorov L.N. Glassy relaxation in soluted photosynthetic reaction centres. *Abstr. 5th Int. Conf. "Physics of Liquid Matter: Modern Problems"*, Kiev, Ukraine (2010) 267; E.S. Kryachko. Three Computational Mise-en-Scenes of Red- and Blue-Shifted Hydrogen Bonding Motifs: Concept of Negative Intramolecular Coupling – What Else? *Int. J. Quantum Chem.* 110 (2010) 104-119; N. Russo, V.Ya. Antonchenko, and E.S. Kryachko. Preface to the Proceedings of the NATO ARW "Molecular Self-Organization in Micro-, Nano-, and Macro-Dimensions: From Molecules to Water, to Nanoparticles, DNA and Proteins" 2008, Kiev, Ukraine. *Int. J. Quant. Chem.* 110 (2010) 1-4; A. Karpfen and E.S.

Kryachko. The Dimers of Glyoxal and Acrolein with H₂O and HF: Negative Intramolecular Coupling and Blue-Shifted C-H Stretch. *Chem. Phys. Lett.* 489 (2010) 39-43; E.S. Kryachko and F. Remacle. 20-nanogold Au₂₀(Td) Cluster and Its Hollow Cage Isomers: Structural and Energetic Properties. *J. Phys.: Conf. Series* 248 (2010) 012026-1-8; E.S. Kryachko. On The Bifunctional Character of Bonding of Gold Clusters: Anchor and Non-Classical X-H...Au Hydrogen Bondings – Nano-Biophysical Aspects. *Вісник Черкаського Університету, Сер. Хім. Науки* 175 (2010) 3-10; Kruchinin S., Nagao H., Aono S. Modern aspect of superconductivity: theory of superconductivity. World Scientific (2010) 232p. (monography); Dzhezheriya Yu., Novak I.Yu., Kruchinin S., Orientational phase transitions of lattice of magnetic dots embedded in a London type superconductors. *Supercond. Sci. Technol.* 23 (2010) P.105011-105016; I.M. Bolesta, V.V. Vistovsky, N.V. Gloskovskaya, L.I. Yarytska Observation of PbI₂ nanoparticles and specific character of their excitonic states in CdI₂ matrix. *Abstr. 11th Europhys. Conf. "Defects in Insulating Materials"* Pecs, Hungary (2010) A15; I.M. Болеста, Н.В. Глосковська, М.Р. Панасюк, Л.І. Ярицька. Співіснування вільних та автолокалізованих високоенергетичних екситонів малого радіусу в кристалічній системі CdI₂-PbI₂. *Матеріали VII міжнар. школи-конференції "Актуальні проблеми фізики напівпровідників"*, Дрогобич, Україна (2010) 31; V.N. Kharkyanen, Yu.M. Barabash, N.M. Berezetskaya, E.P. Lukashev, P.P. Knox, L.N. Christophorov. Peculiarities of light-induced slow protein dynamics in the photosynthetic reaction center. *Chem. Phys. Lett.* 512, 113-117 (2011); Благой Ю.П., Веселков О.Н., Волков С.Н., Говорун Д.М., Євстигнєєв М.П., Жураківський Р.О., Корнелюк О.І., Малєєв В.Я., Семенов М.О., Сорокін В.О., Харкянен В.М., Христофоров Л.М., Шестопалова Г.В. Фізичні принципи молекулярної організації і структурної динаміки біополімерів (монографія). Харків, Видавництво ХНУ (2012), 352с.; L.N. Christophorov. Indirect evidences of conformational regulation in reactions of proteins: How much can be learnt? *Abstr. 2nd Intl. Conf. "Nanobiophysics: Fundamental and Applied aspects"*, Kiev, Ukraine (2011) 30; Kruchinin S., Antonchenko V., Zolotovskiy A. The electronic properties of new Fe-based superconductors. *Task Quarterly* 15, (2011) 101-108; E.S. Kryachko. Stability and Protonation of Multielectron Systems: The Concept of Proton Affinity. I. Vague Limits. *Int. J. Quant. Chem.* 111 (2011) 1792-1807; E.S. Kryachko. On Stability and Protonation of Multi-Electron Systems: The Concept of Proton Affinity. II. Dissociative Proton Attachment and Protonation – Deprotonation Mapping. *Int. J. Quant. Chem.* (2011); E.S. Kryachko and F. Remacle. 20-Nanogold Au₂₀(Td) and Low-Energy Hollow Cages: Void Reactivity. In *Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry and Physics*. Edited by P. Hoggan, J. Maruani, P. Piecuch, G. Delgado-Barrio, and E. J. Brandas. *Progr. Theor. Chem. Phys.* 22, Ch. 30, Springer, Berlin (2011) 573-612; Th. Zeegers-Huyskens and E.S. Kryachko. Methyl Formate and its Mono- and Di-Fluoro-Derivatives: Conformational Manifolds, Basicity and Interaction with HF – Theoretical Investigation. *J. Phys. Chem. A* 115 (2011) 125860-125871; E.S. Kryachko. Density Functional Approach To Many-Electron Systems: The Local-Scaling Transformation Formulation. In: *Theoretical and Computational Developments in Modern Density Functional Theory*. Ed. by A. K. Roy, Nova Science Publishers, New York (2011); E.S. Kryachko. On Molecular Bonding Logic and Matrix Representation of Constant and Balanced Boolean Functions. *Ukr. Phys. J.* 56 (2011) 694-699; I.M. Bolesta, V.V. Vistovskii, N.V. Gloskovskaya, M.R. Panasyuk and L.I. Yarytskaya High-energy Frenkel cation exciton and specific features of its self-trapping in the CdI₂-PbI₂ crystal system. – *Physics of the Solid State*, 2011, v.53, ?4, pp.799-803; O.V. Galchynsky, N.V. Gloskovska, L.I. Yarytska. Trapping and delocalization of charge carriers in CdI₂-PbI₂ crystal system. *Matls. XIII Int. Conf. "Physics and Technology of thin films and nanosystems"*, Ivano-Frankivsk, v.2 (2011) 116; O.V. Galchynsky, N.V. Gloskovska, L.I. Yarytska Influence of PbI₂ nanocrystal inclusions concentration on the trapping center distribution density in the layered crystal system. *Abstr. Int. Meeting on Clusters and Nanostructured Materials (CNM-3)*, Uzhgorod (2012) 131; L.N. Christophorov. Indirect evidences of conformational regulation in reactions of proteins. *Ukr. J. Phys.* 57 (2012) 746-751; Kruchinin S., Nagao H. Nanoscale superconductivity. *Int. J. Mod. Phys. B.*, 26 (2012) 1230013-68; Kruchinin S., Pruschke T. Thermopower for a molecule with vibrational degrees of freedom. *ArXiv* 108.'526 (New J. Phys. 2012); E.S. Kryachko. Modeling Molecular Interactions by Analytic Potentials: Analytic Perturbation Treatment. *Int. J. Quant. Chem.* 112 (2012) 2986-2997; E.S. Kryachko. Gold and Nucleic Acids. In: *Encyclopedia of Metalloproteins*, Springer, 2012; E.S. Kryachko. Density Functional Theory and Molecular Interactions: Dispersion Interactions. *Structure and Bonding*, Editors: Mihai V. Putz and D. Michael P. Mingos. Springer, Berlin, 2012; D.J. Klein, E.S. Kryachko, J. Leszczynski, O. Novaro, and J. Soullard Preface. Ilya G. Kaplan: The path to science – Dotted

Biography. Int. J. Quant. Chem. 112 (2012) 2849–2856; A.V. Gal'chinskii, N.V. Gloskovskaya and L.I. Yaritskaya Carrier trapping and delocalization in PbI₂-containing CdI₂ crystals. Inorg. Matls. 48 (2012) 423–427; I.M. Bolesta, N.V. Gloskovskaya, M.R. Panasyuk, I.M. Rovetskyj, L.I. Yarytska and A.S. Voloshinovskii. Luminescence properties of PbI₂ nanometer-sized particles embedded in CdI₂ matrix. // Abstr. VIII Int. Conf. "Luminescent Detectors and Transformers of Ionizing Radiation", Halle, Germany (2012) P-Tue-05; В.Я. Антонченко, Л.А. Булавін, В.В. Ільїн, Л.М. Максимюк. Моделювання характеристик водних систем. УФЖ 7 (2012) 99–175.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Загородній Анатолій Глібович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Антонченко Віктор Якович

Бомбело Костянтин Васильович

Бугрій Галина Василівна

Герасименко Ірина Миколаївна

Глосковська Наталія Вікторівна

Кручинін Сергій Павлович

Крячко Євген Сергійович

Філіппова Ніна Олександрівна

Христофоров Леонід Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

