Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U001858

Державний реєстраційний номер: 0122U001485

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Ліофільні агрегати та гібридні системи.

Початок етапу: 02.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Проміжний 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.): 1030.837

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дизайн та оптимізація функціональних нанодисперсних систем: ліофільні агрегати, біосумісні золі, гібридні матеріали, фотоелектричні перетворювачи

Назва роботи англійською:

Design and optimization of functional nanodisperse systems: lyophilic aggregates, biocompatible sols, hybrid materials, photovoltaic converters

Реферат українською:

Мета роботи – Оптимізувати метод оцінювання електростатичних поверхневих потенціалів колоїдних частинок. Запропонувати схему протолітичних рівноваг флуоресцеїні в розчинах, яка би адекватно описувала у тому числі і нітропохідні. Охарактеризувати особливості таутомерної рівноваги родамінових сполку у розчинниках різної природи. Провести кількісне співставлення впливу агрегатів каліксаренів та міцел ПАР на рівноваги, спектри поглинання та швидкість хімічних реакцій. Висвітлити різницю в колоїдній стабільності нановуглецевих систем по відношенню до електролітів в розчинниках різної природи. Дослідити закономірності та відмінні риси функціонування динамічних нанесених нанокаталізаторів із складними ландшафтами поверхні потенційної енергії. Встановити взаємозв'язок між конформаційною динамікою барника D205 та його здатності до перенесення електрону на наночастинку TiO2. Дослідити можливості сучасних квантовохімічних методів в описі сольватохромії спряжених систем. Застосувати методів ML для аналізу NA-MD Hamiltonian, визначення того, які геометричні дескриптори найбільш підходять для побудови моделей ML NA-MD Hamiltonian, зменшення складності стандартних моделей ML та тестування продуктивності NA-MD зменшених моделей на основі результатів ab initio NA-MD. Методи дослідження – Молекулярно-динамічне моделювання, спектрофотометрія, динамічне розсіювання світла, кінетичний метод Монте Карло, квантово-хімічні розрахунки, теорія функціоналу густини, поляризаційно-континуальні моделі. В результаті виконання етапу проекту розроблено принципово новий підхід до оцінювання електричних поверхневих потенціалів міцел за допомогою молекулярно–динамічного моделювання. Охарактеризовані властивості двох нових нітрофлуоресцеїнових барвників та родамінів; запропоновано новий pH-незалежний люмінофор, чутливий до водневих зв’язків розчинника. Одержані кількісні характеристики рівноваг і кінетики реакцій в водних розчинах під впливом каліксаренів. Виявлена суттєва стабілізуюча складова міжчас

Реферат англійською:

Purpose – Using of the results of molecular dynamics modelling for estimation of the electrostatic surface potential of micelles. Estimation of the constants of protolytic equilibrium of nitrofluoresceins and rhodamines in nonaqueous solvents. Evaluation of the apparent dissociation constants, spectral characteristics of dyes, and rate constnts of hydrolysis in solutions of calixarene aggregates. Aggregative stability of fullerene sols and suspensions of single walled carbon nanotubes in nonaqueous media. Theoretical and computational methods of examining the frustration of nanosized catalytic centers under real catalytic conditions. Conformation dynamics of the dye D205 on the TiO2 surface, electron transfer in the dye–TiO2 system. Solvatochromism of merocyanine dyes. Using of machine teaching in quantum chemistry with application of the neural net in order to study the interconnection of the interconnection of atomic positions and surface potential energy. Aim of the work – To rationalize the method of estimation of the electrosurface potentials of colloidal particles. To propose a scheme of protolytic equilibrium of fluorescein dyes in solution, wich will adequately describe the nitro derivatives as well. To characterize the specific features of the tautomeric equilibrium of rhodamine dyes in solvents of different nature. To quantitatively compare the influence of the influence of the calixarene aggregates and surfactant micelles on the equilibrium, absorption spectra, and reaction rates of chemical reactions. To elucidate the difference in the stability of the

nanocarbon systems in respect to electrolytes in solutions of different nature. The purpose of the work – to investigate the regularities and distinctive features of the functioning of dynamic supported nanocatalysts with complex landscapes of the potential energy surface. To reveal the interconnection between the conformation dynamics of the dye D205 and its capability to the electron transfer to a TiO

Індекс УДК: 66, 544.354+544.77.022.532

Коди тематичних рубрик: 61

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: новий підхід до оцінювання електричних поверхневих потенціалів міцел за допомогою молекулярно–динамічного моделювання

Назва НТП англійською: the method of estimation of the electrosurface potentials of colloidal particles

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: освітній процес

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Охарактеризовані властивості двох нових нітрофлуоресцеїнових барвників та родамінів; запропоновано новий pH-незалежний люмінофор, чутливий до водневих зв'язків розчинника. Одержані кількісні характеристики рівноваг і кінетики реакцій в водних розчинах під впливом каліксаренів.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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

Mchedlov-Petrossyan N. O., Shekhovtsov S. V., Moskaeva E. G., Omelchenko I. V., Roshal A. D., Doroshenko A. O. New fluorescein dyes with unusual properties: Tetra- and pentanitrofluoresceins. J. Mol. Liquids 2022. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120541

. Farafonov V. S., Lebed A. V., Mchedlov-Petrossyan N. O. Localization of hydrophobized coumarin and xanthene acid–base indicators in micelles. Theoretical and Experimental Chemistry 2022, 58.

https://doi.org/10.1007/s11237-022-09734-5.

Farafonov V. S., Lebed A. V., Nerukh D. A., Mchedlov-Petrossyan N. O. Estimation of Nanoparticle's Surface Electrostatic Potential in Solution Using Acid–Base Molecular Probes I: In Silico Implementation for Surfactant Micelles. J. Phys. Chem. B 2022, 126. https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.2c07028

Farafonov V. S., Lebed A. V., Nerukh D. A., Mchedlov-Petrossyan N. O. Estimation of nanoparticle's surface electrostatic potential in solution using acid-base molecular probes II: Insight from atomistic simulations of micelles. J. Phys. Chem. B 2022, 126. https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.2c07028.

Cheipesh T. A., Mchedlov–Petrossyan N. O., Bogdanova L. N., Kharchenko D. V., Roshal A. D., Vodolazkaya N. A., Taranets Yu. V., Shekhovtsov S.V., Rodik R.V., Kalchenko V.I. Aggregates of cationic calix[4]arenes in aqueous solution as media for governing protolytic equilibrium, fluorescence, and kinetics. J. Mol. Liquids 2022, 366. 119940.

Mchedlov-Petrossyan N. O., Marfunin M. O., Tikhonov V. A., Shekhovtsov S. V. Unexpected Colloidal Stability of Fullerenes in Dimethyl Sulfoxide and Related Systems. Langmuir 2022, 38, 10000-10009. https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.2c01408

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, 117948. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.117948.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Катрич Віктор Олександрович, д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

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

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

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

Коваленко Сергій Миколайович
(д.х.н., 15.00.02)

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

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

Пантелеймонов Антон Віталійович
(к. х. н.)

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

