Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U002387

Державний реєстраційний номер: 0122U001485

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-03-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Теоретичне та експериментальне дослідження наносистем, маючих практичне значення.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

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.): 1039.000

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:

Визначено pKa серії нітрофлуоресцеїнів в диметилсульфоксиді та у міцелярних розчинах; запропоновано новий pH-незалежний флуорофор, чутливий до водневих зв'язків розчинника. За допомогою моделюванням вперше оцінено характер агрегації іонів ПАР у воді без участі протиіонів. Встановлено характер орієнтації сольватохромних індикаторів Райхардта різної гідрофобності в міцелах ПАР. Розроблено принципово новий підхід до оцінювання електричних поверхневих потенціалів міцел за допомогою МД моделювання. З використанням кінетичного методу Монте Карло та апарату випадкових мозаїк досліджено закономірності функціонування гетерогенних каталізаторів з регулярними та випадковими масивами нанесених нанокластерів, динамічних в умовах реакції. Проаналізовано фактори управління такими каталітичними системами, які значною мірою визначаються узгодженістю внутрішнього часового масштабу кластера та масштабу постачання реагентів. Протягом виконання проекту було розроблено та програмно реалізовано ряд нових хемометрічних підходів та апробовано сучасні квантовохімічні методи опису електронної будови та спектральних властивостей (зокрема сольватохромії). Встановлено можливості різних варіантів поляризаційно континуальної моделі в описі сольватохромії. З використанням МД моделювання досліджено будову і фізико-хімічні характеристики pH-залежної поведінки нового покоління «розумних» наночастинок золота з хемісорбованим глутатіоном та показано потенціал їхнього використання при різному pH. Розроблено методи віртуального скринінгу баз даних π-систем для пошуку барвників із заданими спектральними властивостями, і на основі результатів прогнозування синтезовано нові сенсибілізатори-барвники, які можуть бути використовані в сонячних елементах, чутливих до барвників (СБСК).

Реферат англійською:

The pKa of the nitrofluorescein series in dimethyl sulfoxide and in micellar solutions was determined; a new pH-independent fluorophore sensitive to solvent hydrogen bonds was proposed. The nature of the aggregation of surfactant ions in water without the participation of counterions was first assessed using simulations. The nature of the orientation of solvatochromic Reichardt indicators of different hydrophobicity in surfactant micelles was established. A fundamentally new approach to estimating the electric surface potentials of micelles using MD simulations was developed. With the use of kinetic Monte Carlo method and random mosaic apparatus, the regularities of the functioning of heterogeneous catalysts with regular and random arrays of deposited nanoclusters, dynamic under reaction conditions, have been investigated. The control factors of such catalytic systems, which are largely determined by the consistency of the internal time scale of the cluster and the scale of reagent supply, have been analyzed. During the project, a number of new chemometric approaches were developed and implemented in software. Also the modern quantum chemical methods for describing the electronic structure and spectral properties (in particular, solvatochromizm) were tested. The possibilities of different variants of the polarization continuum model in the description of solvatochromism are established. The structure and physicochemical properties of pH-dependent "smart" gold nanoparticles with chemisorbed glutathione were investigated using molecular dynamics simulations, demonstrating their potential uses at various pH levels. Methods for virtual screening of π-system databases were developed to search for dyes with specified spectral properties, and new sensitizers/dyes used in dye sensitized solar cells (DSSC) were synthesized based on

the prediction results.

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: Дизайн та оптимізація функціональних нанодисперсних систем

Назва НТП англійською: Design and optimization of functional nanodisperse systems

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: ВНЗ України

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено принципово новий підхід до оцінювання електричних поверхневих потенціалів міцел за допомогою МД моделювання. З використанням кінетичного методу Монте Карло та апарату випадкових мозаїк досліджено закономірності функціонування гетерогенних каталізаторів з регулярними та випадковими масивами нанесених нанокластерів, динамічних в умовах реакції

Соціально-економічна спрямованість НТП: Хімія

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

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) Dukhopelnikov E., Bereznyak E. and Ivanov V., Gladkovskaya N., Blyzniuk I., Khrebtova A. S., IR Spectra of Proflavine in Complex with Polyethylene Glycol. Quantum Chemistry Investigation vs Experimental Data. 2024, http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.5100382 (на 8 стадії рецензування).

2) Zakharov A. B., Kyrpa M., Kyrychenko A. V., Kovalenko S. M., Kalugin O. N., Ivanov V. V., Adamowicz L. Towards the computational design of organic molecules with specified properties. Structural Chemistry.2024 https://doi.org/10.1007/s11224-024-02441-y.

3) Dmytro Anokhin, Mykhailo Berdnyk and Vladimir V. Ivanov Application of LARS-LASSO logistic regression to QSAR/QSPR classification problems // (submitted). 4) M. Kyrpa, S. M. Kovalenko, and V. V. Ivanov. Electronic structure of mesoionic compounds. The classification problem. Kharkiv University Bulletin. Chemical Series. 2024, Issue 42(65), P. 38-44. https://doi.org/10.26565/2220-637X-2024-42-04.

4) Vaksler Y., Hryhoriv H. V., Ivanov V. V., Kovalenko S. M., Georgiyants V. A. and Langer T. Synthesis, analysis of molecular and crystal structures, estimation of intermolecular interactions and biological properties of 1-benzyl-6-fluoro-3-[5-(4-methylcyclohexyl)-1,2,4- oxadiazol-3-yl]-7-(piperidin-1-yl) quinolin-4-one. Acta Cryst. 2023, E79, 192–200. https://doi.org/10.1107/S2056989023001305.

5)M. Kyrpa, S. M. Kovalenko, and V. V. Ivanov. Electronic structure of mesoionic compounds. The classification problem. Kharkiv University Bulletin. Chemical Series. 2024, Issue 42(65), P. 38-44. https://doi.org/10.26565/2220-637X-2024-42-04.

6)Пантелеймонов А. В., Анохін Д. О., Іванов В. В. Робастне оцінювання параметрів регресій. Теорія нечіткості та інші моделі. Вісник Харківського національного університету, серія "Хімія". 2022, вип. 38 (61), 6-15. https://doi.org/10.26565/2220-637X-2022-38-01.

7)Христенко І. В., Іванов В. В. Сольватохромія барвника нільський червоний. TD- DFT розрахунки і експериментальні дані. Вісник Харківського національного університету, серія "Хімія". 2022, вип. 39 (62), 30-37. https://doi.org/10.26565/2220-637X-2022-39-03.

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

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

Гога Сергій Тарасович
(к. х. н.)

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

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)

Христенко Інна Василівна
(к. х. н.)

Черножук Тетяна Василівна

Шаповалов Сергій Андрійович
(д. х. н.)

Шеховцов Сергій Юрійович

Відповідальний за підготовку облікових документів Собран Н.

Телефон +38 (066) 803-49-28

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

