Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U001103

Державний реєстраційний номер: 0120U102174

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-01-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Побудова теорії та числове моделювання процесів взаємодії електромагнітних хвиль з керованими рідким кристалом наноструктурами, що містять плівки матеріалів з керованими діелектричними характеристиками, тонкі плівки оксидів та нітридів металів та неметалів, а також рідкокристалічні еластомери.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393333

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.): 963.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Моделювання оптичних властивостей гібридних органічно-неорганічних плазмонних нано-структур для застосувань у біо- та нано-фотоніці.

Назва роботи англійською:

Modeling of optical properties of hybrid organic-inorganic plasmonic nano-structures for applications in bio- and nano-photonics.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: наноструктури білкового та нуклеїнового типу, білкова молекула, електронна підсистема білків, азотно-киснева модель, білковоподібні нанодроти, молекула ДНК, поліпептидні фрагменти білкових молекул, питома провідність. Мета роботи: отримання нових знань про відгуки досліджуваних конденсованих середовищ органічного походження на дію електромагнітних полів та термічних впливів для прогнозування їх фізичних властивостей, корисних при створенні та застосуванні сенсорів, зокрема, сенсорів на плазмонному резонансі, біосенсорів. Методи дослідження: теоретичний та математичний аналіз даних, порівняння з експериментом, аналітично-числове моделювання. Встановлено існування у білковій молекулі напрямленого електростатичного поля за відсутності зовнішнього поля. Воно пов'язане з неоднорідним характером системи, яка обумовлена радикалами в амінокислотах, що утворюють білок і забезпечує наноструум. Показано, що первинна структура білкової молекули можне розглядатися як напівпровідниковий нанодріт. Проаналізована залежність розрахованих станів провідності від ефективного електростатичного поля. Показано, що зі збільшенням величини поля стани провідності зміщуються в бік зменшення енергії. Побудовано та обґрунтовано теоретичну модель переносу електрона через зону провідності білковоподібних нанодротів в реальних температурних умовах. Досліджена можливість керування переносом електронів по білковоподібному нанодроту, як складової метаболічного процесу. Розглянуто вплив магнітного поля на перенос електрона по білковому нанодроту. Встановлені умови, при яких вплив магнітного поля є позитивним, а при яких синтез АТФ може блокуватись. Розглянуто молекулярний ланцюжок ДНК із врахуванням детальної будови нуклеотидної пари у якості одного з каналів переносу електрона у метаболічному процесі. Показано, що можливість переносу електрона між полінуклеотидними ланцюгами значно менша ніж вздовж ланцюгів.

Реферат англійською:

Research object: protein and nucleic type nanostructures, protein molecule, electronic subsystem of proteins, nitrogen-oxygen model, protein-like nanowires, DNA molecule, polypeptide fragments of protein molecules, specific conductivity. The purpose of the work: obtaining new knowledge about the responses of the investigated condensed mediums of organic origin to the action of electromagnetic fields and thermal influences in order to predict their physical properties, useful in the creation and application of sensors, in particular, sensors based on plasmon resonance, biosensors. Research methods: theoretical and mathematical data analysis, comparison with experiment, analytical and numerical modeling. The existence of a directed electrostatic field in a protein molecule in the absence of an external field has been established. It is related to the inhomogeneous nature of the system, which is due to the radicals in the amino acids that form the protein and provides the nanocurrent. It is shown that the primary structure of a protein molecule can be considered as a semiconductor nanowire. The dependence of the calculated conduction states on the effective electrostatic field is analyzed. It is shown that with an increase in the magnitude of the field, the conduction states shift in the direction of decreasing energy. A theoretical model of electron transfer through the conduction zone of protein-like nanowires under real temperature conditions has been constructed and substantiated. The possibility of controlling the transfer of electrons along a protein-like nanowire as a component of the metabolic process was investigated. The influence of the magnetic field on the

electron transfer along the protein nanowire is considered. The conditions under which the influence of the magnetic field is positive and under which ATP synthesis can be blocked have been established.

Індекс УДК: 533.9, 535;539.183/.184;681.7;77

Коди тематичних рубрик: 29.27, 29.31

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Решетняк Віктор Юрійович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Існування у білковій молекулі напрямленого електростатичного поля за відсутності зовнішнього поля.

Назва НТП англійською: The existence of a directed electrostatic field in a protein molecule in the absence of an external field.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Рекомендації для застосування результатів в технологіях виготовлення керованих рідким кристалом нових типів гібридних плазмонних наноструктур.

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Встановлено існування у білковій молекулі напрямленого електростатичного поля за відсутності зовнішнього поля. Воно пов'язане з неоднорідним характером системи, яка обумовлена радикалами в амінокислотах, що утворюють білок і забезпечує нанострум. Показано, що первинна структура білкової молекули можне розглядатися як напівпровідниковий нанодріт. Проаналізована залежність розрахованих станів провідності від ефективного електростатичного поля. Показано, що зі збільшенням величини поля стани провідності зміщуються в бік зменшення енергії. Побудовано та обґрунтовано теоретичну модель переносу електрона через зону провідності білковоподібних нанодротів в реальних температурних умовах. Досліджена можливість керування переносом електронів по білковоподібному нанодроту, як складової метаболічного процесу. Розглянуто вплив магнітного поля на перенос електрона по білковому нанодроту. Встановлені умови, при яких вплив магнітного поля є позитивним, а при яких синтез АТФ може блокуватись. Розглянуто молекулярний ланцюжок ДНК із врахуванням детальної будови нуклеотидної пари у якості одного з каналів переносу електрона у метаболічному процесі. Показано, що можливість переносу електрона між полінуклеотидними ланцюгами значно менша ніж вздовж ланцюгів. Встановлено, що питома провідність ДНК не є константою, як у звичайних провідників, а зменшується із збільшенням довжини ланцюга.

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:**
- **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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Статей в журналах, що індексуються БД Scopus та/або Web of Science Core Collection (WoS) (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 18; англомовних статей та тез доповідей у матеріалах міжнародних конференцій, що індексуються БД Scopus або WoS (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 8; статей у журналах, що входять до переліку фахових видань України - 20; монографій - 9; підручників, навчальних посібників, словників, довідників - 1;

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Атамась Наталія Олексіївна
(д. ф.-м. н.)

Бєлих Світлана Петрівна
(к. ф.-м. н.)

Дацюк Віталій Васильович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Задорожний Віктор Іванович
(к. ф.-м. н.)

Науменко Світлана Миколаївна

Пінкевич Ігор Павлович
(д. ф.-м. н., 01.04.05)

Супрун Анатолій Дмитрович
(к. ф.-м. н.)

Шмельова Людмила Володимирівна
(к. ф.-м. н.)

Щербаков Крістіан Меселе
(к. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Катасонова В.В.

Телефон +38 (044) 239-31-88

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності