

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U002309

Державний реєстраційний номер: 0125U002318

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-02-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Характеризація зразків нефункціоналізованих ДХПМ

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього документа: Проміжний 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, 380442393230

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 Берестейський, 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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201390

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1079.454

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив типу функціоналізації на спектральні і електричні властивості 2D-наноструктур дихалькогенідів перехідних металів та новітніх гібридних наноматеріалів на їхній основі

Назва роботи англійською:

The influence of the type of functionalization on the spectral and electrical properties of 2D nanostructures of transition metal dichalcogenides and novel hybrid nanomaterials based on them

Реферат українською:

Проект присвячено вивченню впливу типу функціоналізації на спектральні і електричні властивості 2D-наноструктур дихалькогенідів перехідних металів (ДХПМ) та новітніх 1D/2D/3D гібридних матеріалів на їхній основі. ДХПМ є одними з найперспективніших матеріалів у сфері нанотехнологій завдяки своїм унікальним властивостям, однак, для широкомасштабного застосування у складних системах з регульованими властивостями необхідно поліпшити їхні спектральні та електричні характеристики, є одним із ключових методів керування якими є функціоналізація поверхні ДХПМ. Метою Проекту є вивчення впливу різних типів та матеріалу функціоналізації на спектральні і електричні властивості 2D-наноструктур ДХПМ, що є основою для розробки фундаментальних засад створення багатокомпонентних гібридних наноматеріалів з керованими та покращеними оптичними, електричними, магнітними тощо властивостями в залежності від сфери застосування. Для досягнення поставленої мети необхідно виконати наступні завдання: (1) Дослідити методами оптичної спектроскопії енергетичні спектри коливальних та електронних елементарних збуджень кристалів та періодичних наноструктур гексагональних ДХПМ, лінійних π -електронних спряжених систем, функціоналізованих модифікацій ДХПМ. Оцінити можливості керування оптичними властивостями для конкретних застосувань. (2) Дослідити вплив функціоналізації на електронні властивості ДХПМ. (3) Із залученням методів квантової хімії розрахувати електронні конфігурації, положення енергетичних рівнів основного та вищих збуджених станів, енергії оптичних переходів для лінійних π -електронних спряжених систем, моношарів ДХПМ та гібридних наносистем на їхній основі. (4) Інтерпретувати отримані експериментальні дані, розробити теоретичні моделі для пояснення зареєстрованих ефектів. (5) Порівняти властивості функціоналізованих ДХПМ з аналогами на основі вуглеграфітових матеріалів. Визначити переваги і недоліки різних підходів до функціоналізації та їх впливу на кінцеві властивості матеріалів.

Реферат англійською:

The project is dedicated to studying the influence of the type of functionalization on the spectral and electrical properties of 2D nanostructures of transition metal dichalcogenides (TMD) and the latest 1D/2D/3D hybrid materials based on them. TMD are one of the most promising materials in the field of nanotechnology due to their unique properties, however, for large-scale application in complex systems with controllable properties, it is necessary to improve their spectral and electrical characteristics, one of the key control methods of which is the functionalization of the TMD surface. The aim of the Project is to study the influence of different types and materials of functionalization on the spectral and electrical properties of 2D nanostructures of TMD, which is the basis for developing fundamental principles for the creation of multicomponent hybrid nanomaterials with controllable and improved optical, electrical, magnetic, etc. properties depending on the field of application. To achieve the goal, it is necessary to perform the following tasks: (1) To study the energy spectra of vibrational and electronic elementary excitations of crystals and periodic nanostructures of hexagonal TMD, linear π -electron conjugated systems, and functionalized TMD modifications using optical spectroscopy methods. To assess the possibilities of controlling optical properties for specific applications. (2) To investigate the effect of functionalization on the electronic properties of TMD. (3) Using quantum chemistry methods, to calculate the

electronic configurations, positions of energy levels of the ground and higher excited states, and optical transition energies for linear π -electron conjugated systems, TMD monolayers, and hybrid nanosystems based on them. (4) To interpret the obtained experimental data, to develop theoretical models to explain the registered effects. (5) To compare the properties of functionalized TMD with analogues based on carbon-graphite materials.

Індекс УДК: 546.75, 539.21:539.12.04; 548:539.12.04; 538.95Ф405:539.12.04 , 535.343.2 , 535.37 , 539.19; 544.14

Коди тематичних рубрик: 31.17.15.19, 29.19.21, 29.31.21, 29.31.23, 31.15.03

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Наumenко Антоніна Прокопіївна

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання: старший науковий співробітник

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Характеризація експериментальних зразків методами оптичної спектроскопії

Назва НТП англійською: Characterization of experimental samples by optical spectroscopy methods

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Інше (база даних експериментальних результатів)

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Комплексні дослідження похідних гібридних наноматеріалів на основі ДХПМ методами: рентгенівської, електронної, оптичної та коливальної спектроскопії (спектрофотометрія, фотолюмінесценція, ІЧ та Раманівська спектроскопія), вимірювання електричних характеристик.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля: не впливає

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Kudrya V. Y., Dubey I. Y., Negrutska V. V., Naumenko A. P. Auto-luminescence study of thermal unfolding of DNA G-quadruplexes // RSC Advances. – 2025. – Vol. 15, No. 53. – P. 45628–45635. – DOI:

<https://doi.org/10.1039/D5RA04883D>. Cherpurna O., Yakovliev A., Ziniuk R., Vretik L. O., Qu J., Ohulchanskyy T. Y. Polymeric nanoparticles with a thermoresponsive shell loaded with fluorescent molecules allow for thermally enhanced fluorescence imaging and singlet oxy

- Chepurna O., Yakovliev A., Ziniuk R., Vretik L. O., Qu J., Ohulchanskyy T. Y. Polymeric nanoparticles with a thermoresponsive shell loaded with fluorescent molecules allow for thermally enhanced fluorescence imaging and singlet oxygen generation // *Nanoscale Advances*. – 2025. – Vol. 7, No. 7. – P. 1946–1961. – DOI: https://doi.org/10.1039/D4NA00687A.
- Perets Y., Vovchenko L., Len T., Matzui L. Y., Żywczak A., Mazurenko J. Study of dielectric and magnetic properties of epoxy composites with combined nanocarbon/magnetic fillers // *Solid State Sciences*. – 2025. – Vol. 167. – Art. 107976. – DOI: https://doi.org/10.1080/15421400802458456.
- Olenchuk M., Monastyrskyi G., Gnatyuk O., Kupchak I., Dovbeshko G. The influence of 2D WS₂ nanoparticles on the liposomes formation, morphology and spectral properties // *Journal of Molecular Structure*. – 2026. – Vol. 1352. – Art. 144277. – DOI: https://doi.org/10.2139/ssrn.5196556.
- Zheltonozhskaya T., Kobrina L., Vretik L., Riabov S., Klymchuk D. Kinetic and structural features of the formation of nanosilver/xanthan composites // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2025. – Vol. 769, No. 7–8. – P. 706–722. – DOI: https://doi.org/10.1080/15421406.2025.2497098.
- Doroshenko I., Rudenok T., Lesiuk A., Davtian L., Drozdova A. Peculiarities of ibuprofen interaction with polyethyleneglycol polymer matrix // *Low Temperature Physics*. – 2025. – Vol. 51, No. 2. – P. 237–241. – DOI: https://doi.org/10.1063/10.0009736.
- Monastyrskyi G., Gnatyuk O., Gubareni I., Kupchak I., Dovbeshko G. MoS₂ 2D nanoparticles as inducers of changes in liposomes formation and their spectroscopic properties // *Low Temperature Physics*. – 2025. – Vol. 51, No. 2. – P. 261–273. – DOI: https://doi.org/10.1063/10.0035414.
- Borova M., Kapush O., Dzhagan V., Naumenko A., Blume Y., Yemets A. Conjugates of biofabricated Ag₂S quantum dots with monoclonal antibodies for microtubule visualization // *Cytology and Genetics*. – 2025. – Vol. 59, No. 4. – P. 359–368. – DOI: https://doi.org/10.3103/S0095452725040036.
- Gaponov A. M., Maksimuk V. S., Pavlenko O. L., Teselko P. O., Kachkovsky O. D. Electron properties of nanocomposites of the squaraine dyes with SWNTs and MWCNTs: optical spectroscopy and modelling // *Nanosistemi Nanomateriali Nanotehnologii*. – 2025. – Vol. 23, No. 2. – P. 467–476. – DOI: https://doi.org/10.15407/nnn.23.02.0467.
- Rud O. D., Matsui L. Yu., Vovchenko L. L., Naumenko A. P., Pazdriy Y. Ye., Vinnychenko D. V. Synthesis, structure and electromagnetic properties of composite materials based on carbon nanospheres // *Nanosistemi Nanomateriali Nanotehnologii*. – 2025. – Vol. 23, No. 1. – P. 135–148. – DOI: https://doi.org/10.15407/nnn.23.01.0135.
- Nurmurodova G., Doroshenko I., Murodov G., Khujamov U. FTIR and DFT study of (CH₃)₂CO•••HCl hydrogen-bonded complex // *Ukrainian Journal of Physics*. – 2025. – Vol. 70, No. 6. – P. 391–405. – DOI: https://doi.org/10.15407/ujpe70.6.381.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна

д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Вретік Людмила Олександрівна

(д. х. н., професор)

Гнатюк Олена Петрівна

(д. ф.-м. н., с.д.)

Дорошенко Ірина Юріївна

(д. ф.-м. н., с.д.)

Кудря Владислав Юрійович

(к. ф.-м. н., доцент, 01.04.05)

Лень Тетяна Анатоліївна

(к. ф.-м. н.)

Лосицький Михайло Юрійович

(к. ф.-м. н., 01.04.05)

Мацуї Людмила Юріївна

(д. ф.-м. н., проф., 01.04.07)

Навозенко Олександр Миколайович

(к. ф.-м. н., 01.04.05)

Онанко Анатолій Петрович

(к. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Павленко Олена Леонідівна

(д. ф.-м. н., доц.)

Ткач Назарій Васильович

Турков Олег Володимирович

Відповідальний за підготовку

Бурих Алла Анатоліївна

облікових документів

Телефон

+380679337800

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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

Юрченко Тетяна Анатоліївна

