Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U001382

Державний реєстраційний номер: 0122U000871

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Модель формування КТ при дії гідростатичного тиску та ультразвукової хвилі для їх біомедичних застосувань

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): Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02125438

Місцезнаходження: вул. Івана Франка, буд. 24, м. Дрогобич, Дрогобицький р-н., Львівська обл., 82100, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380324410474

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1040.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження баричних властивостей квантових точок з багатошаровою оболонкою для біомедичних застосувань з використанням нейромережі

Назва роботи англійською:

Investigation of baric properties of quantum dots from a multilayer system for biomedical applications using a neural network

Реферат українською:

На основі методу самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку досліджено деформаційні ефекти у квантових точках ядро-CdSe / оболонка-ZnS/CdS/ZnS, які взаємодіють з альбуміном крові людини. Розраховано тиск на поверхні квантової точки, який виникає внаслідок електростатичного притягання молекул альбуміну крові людини, залежно від геометричних розмірів квантової точки, середньої концентрації електронів та концентрації альбуміну. Встановлено закономірності зміни деформації та зонної структури біонанокомплексу квантової точки з багатошаровою оболонкою з альбуміном крові людини при зміні геометричних розмірів і структури квантової точки та поверхневої концентрації альбуміну крові. Показано, що на відміну від біонанокомплексів CdSe/альбумін крові, в біонанокомплексах CdSe/ZnS/CdS/ZnS–альбумін крові виникають суттєві деформації, які можуть призводити до енергетичного зсуву краю зони провідності на 40 меВ. Побудовано модель напівпровідникової квантової точки з багатошаровою оболонкою та біонанокомплексу кантова точка – альбумін крові людини, які містяться в живій клітині. Досліджено закономірності зміни деформації матеріалів квантової точки при зміні еластичності клітини (модуля всебічного стиску) за різних радіусів ядра, товщини окремих шарів оболонки та поверхневої концентрації молекул альбуміну. Показано, що наявність альбуміну крові людини на поверхні квантової точки суттєво збільшує її чутливість до тиску, спричиненого оточуючим середовищем (живою клітиною).

Реферат англійською:

Based on the method of self-consistent electron-deformation coupling, the deformation effects in the CdSe-core / ZnS/CdS/ZnS-shell quantum dots, which interact with human serum albumin, were investigated. The pressure on the quantum dot surface, which arises due to the electrostatic attraction of human serum albumin molecules, is calculated, depending on the geometric sizes of quantum dot, the average electron concentration and the albumin concentration. The regularities of change of deformation and band structure of the bionanocomplex of multilayer shell quantum dot with human serum albumin at change of geometrical sizes and structure of quantum dot and surface concentration of human serum albumin are established. It is shown that, in contrast to CdSe / human serum albumin bionanocomplexes, the significant deformations arise in the CdSe / ZnS/CdS/ZnS – human serum albumin bionanocomplexes, which can lead to an energy shift of the edge of the conduction band by 40 meV. The model of the semiconductor quantum dot with a multilayer shell and the quantum dot-human serum albumin bionanocomplex, which are contained in a living cell, was constructed. The regularities of changes in deformation of materials of the quantum dot with changes in cell elasticity (comprehensive modulus) at different core radii, thicknesses of individual shell layers, and surface concentration of albumin molecules were investigated. It is shown that the presence of human serum albumin on the surface of the quantum dot significantly increases its sensitivity to pressure caused by the surrounding medium (living cell).

Індекс УДК: 539.12.01;539.12:530.131, УДК 539.12-164; 539.3

Коди тематичних рубрик: 29.05.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:Столярчук Ігор Дмитрович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Математична та нейромережева модель біонанокомплексу квантова точка з багатошаровою оболонкою – альбумін крові людини (HSA).

Назва НТП англійською: Mathematical and neural network model of the quantum dot with a multilayer shell – human serum albumin (HSA) bionanocomplex.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: наукові публікації

Галузь застосування: дослідження у галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: 1. У межах теорії самоузгодженого електрон-деформаційного зв'язку з використанням методу деформаційного потенціалу та штучних нейронних мереж розроблено модель біонанокомплексу КТ з багатошаровою оболонкою – HSA. Запропонована теорія самоузгодженим чином враховує модифікацію зонної структури під впливом деформацій. Розроблена структура згорткової нейронної мережі з діагоналізованим об'єднанням мінімізує втрату інформації при використанні глибинного навчання.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: ЗВО, наукові установи

Перспективні ринки: науково-виробничі комплекси, наукові установи

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. Kuzyk O.V., Dan'kiv O.O., Stolyarchuk I.D., Peleshchak R.M. The deformation effects in isovalent doping of CdSe quantum dots with a multilayer shell for their biomedical applications // Applied Nanoscience. – 2023. – V. 13. – P.

7007–7015.

2. Kuzyk O., Dan'kiv O., Peleshchak R., Stolyarchuk I., Kuhivchak V. Modeling the deformation of the semiconductor quantum dot with a multilayer shell in a living cell // Physics and Chemistry of Solid State. – 2023. – V. 24. – Is. 4. – P. 675–681.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Бодак Валентина Анатоліївна
д. філ. н., 09.00.11

Перелік осіб-виконавців

Гадзаман Іван Васильович
(к. ф.-м. н., 01.04.00)

Гольський Віталій Богданович
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Даньків Олеся Омелянівна
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Кузик Олег Васильович
(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Пелещак Іван Романович
(д.філософ, 124)

Пелещак Роман Михайлович
(д. ф.-м. н., 01.04.10)

Відповідальний за підготовку облікових документів Перхун Л.В.

Телефон +38 (032) 443-33-32

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

