

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U006250

Державний реєстраційний номер: 0107U008581

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-06-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Адаптація методу Монте -Карло (з квантово-хімічним обчисленням енергії взаємодії між діелектричною наночастинкою та білковою молекулою) для опису еволюції адсорбованої на поверхні нанокластера біологічно активних молекул.

Початок етапу: 04.2009

Закінчення етапу: 12.2009

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 424-11-35 , 424-35-67

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 20

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Теоретичне моделювання механізмів взаємодії наночастинок металів, напівпровідників і діелектриків між собою та біологічно активними молекулами

Назва роботи англійською:

Theoretical modeling mechanisms of interaction of metal, semiconductor, and dielectric nanoparticles between themselves and with bioactive molecules

Реферат українською:

В межах нелокальної електростатики показано, що мембранний потенціал клітин визначається екрануючими властивостями електролітів всередині клітини та поза нею (для врахування просторової дисперсії в діелектричних функціях водних розчинів електролітів типу 1-1 використано загальновідоме наближення Дебая-Хюккеля) та густиною заряду на внутрішній та на зовнішній поверхнях мембрани.

Реферат англійською:

It has been shown within the frameworks of non-local electrostatics that the cell membrane potential $V_j(x)$ is determined by screen properties of electrolytes inside the cell and outside it (the well-known Debye-Huckel approach is used in order to take into account a spatial dispersion in the dielectric functions $\epsilon_{1,3}(k)$ for aqueous solutions of 1-1 type electrolytes), and charge density ρ_1 on inner and that ρ_2 on outer membrane surfaces.

Індекс УДК: 544, 544.23

Коди тематичних рубрик: 31.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лобанов Віктор Васильович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Теоретичне моделювання механізмів взаємодії наночастинок металів, напівпровідників і діелектриків між собою та біологічно активними молекулами

Назва НТП англійською: Theoretical modeling mechanisms of interaction of metal, semiconductor, and dielectric nanoparticles between themselves and with bioactive molecules

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.1

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У рамках методу функцій Гріна нелокального рівняння Пуассона проведені розрахунки структурного потенціалу в несиметричній по об'ємних і поверхневих характеристиках системі двох твердих тіл, розділених надтонкою вакуумною щільною . Урахування приводить до виникнення приповерхневих областей просторового заряду, обумовлених мікроскопічною (атомною) структурою твердотілих поверхонь. Отримано аналітичні вирази для розрахунку структурного потенціалу в рамках наближення Томаса-Фермі для функцій діелектричної проникності металів для системи металл-вакуум-металл (МВМ). Для несиметричної по об'ємних параметрах МВМ системи розраховані також зарядовий потенціал , обумовлений порушеннями умов квазінейтральності поверхонь.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2012

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НДІ

Перспективні ринки: Україна, Росія

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Теоретический расчет структурного потенциала в сверхтонкой вакуумной щели между двумя твердыми телами / Л.Г. Ильченко, В.В. Лобанов // Физико-химия наноматериалов и супрамолекулярных структур. - Т. 2. - К.: Наук. думка, 2007. - С. 52-81. 2. Влияние атомной структуры поверхности на электростатический потенциал взаимодействия заряда с поверхностью металла во внешних электрических полях / Л.Г. Ильченко, Т.В. Горайчук, В.В. Лобанов // Химия, физика и технология поверхности. - 2007. - Вып. 13. - С. 4-12. 3. Ильченко Л.Г., Лобанов В.В. Роль атомної структури поверхонь у формуванні потенціалу у вакуумному проміжку між близькорозділеними металом та напівпровідником // Химия, физика и технология поверхности: Межвед. сб. науч. трудов / Ин-т химии поверхности им. А.А. Чуйко НАН Украины. - К.: Наук. думка, 2008. - Вып. 14. С. 4351. 4. Ильченко Л., Ильченко В., Лобанов В. Потенціал сил зображення між близько розділеними вакуумним проміжком напівпровідника і розмірно-квантованою плівкою металу // Радіофізика та електроніка. - 2008. - № 11. - С. 29-34. 5. I'chenko L.G., I'chenko V.V., Lobanov V.V. Interaction potential between two closely spaced dielectric surfaces // Nanomaterials and Supramolecular Structures. Physics, Chemistry, and Applications Shpak A.P., Gorbyk P.P. (Eds.), Springer Science + Business Media B.V. - 2009. - P. 22-32.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Картель Микола Тимофійович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Ільченко Л.Г.

Загоровський Г.М.

Лобанов В.В.

Сидоренко І.Г.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

