

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005720

Державний реєстраційний номер: 0123U103303

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Створення та використання QSAR підходів для опису структури отриманих нанорозмірних оксидних сполук магнію. Розробка методів отримання наноматеріалів на основі оксидних сполук магнію. Аналіз отриманих зразків фізичними методами та підтвердження їх розмірних характеристик.

Початок етапу: 07.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

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, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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.): 64.700

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Створення та характеристика безпечності і біологічної активності нанорозмірних оксидних сполук магнію.

Назва роботи англійською:

Creation and characterization of the safety and biological activity of nanosized magnesium oxide compounds.

Реферат українською:

Було побудовано 1D-QSAR модель з відповідними статистичними параметрами. В результаті проведення процедури Y-Scrambling отримано такі показники: $R^2(\text{scr}) = 0,30 \pm 0,04$ і $Q^2(\text{scr}) = 0,12 \pm 0,06$. Значну роль (65%) відіграють перехресні параметри різних пар дескрипторів, що свідчить про важливість впливу ефектів взаємодії різних чинників, які описують наночастинки. Для 1D-QSAR моделі щодо клітин E.coli загальний внесок параметрів «рідкої краплі» близько 25%, з характеристик безпосередньо оксидів основний вплив на цитотоксичність надає заряд йона металу (понад 50%), переважну роль у прояв цитотоксичності грає природа оксиду. Було проведено прогнозування цитотоксичності щодо бактерії E. Coli для нанорозмірного оксиду магнію. При цьому радіус індивідуальних наночастинок MgO варіювався в межах (від 15 до 150 нм) значень радіусів індивідуальних наночастинок інших оксидів вибірки, за якими була побудована модель, при цьому наночастинки MgO з радіусом 150 нм не потрапляють в область застосування моделі. Проведено термічну обробку $\text{Mg}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ при температурі 800°C на повітрі, у вакуумі та в аргоні. Методом ІЧ спектроскопії встановлено, що термообробка $\text{Mg}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$ при 800°C в атмосфері аргону має найкращий результат утворення MgO, спостерігається модуляція спектрів зразків отриманих у досліджуваних середовищах, що свідчить про нанодисперсність отриманого продукту.

Реферат англійською:

A 1D-QSAR model with appropriate statistical parameters was constructed. As a result of the Y-Scrambling procedure, the following indicators were obtained: $R^2(\text{scr}) = 0,30 \pm 0,04$ and $Q^2(\text{scr}) = 0,12 \pm 0,06$. A significant role (65%) is played by the cross-parameters of various pairs of descriptors, which indicates the importance of the interaction effects of various factors that describe nanoparticles. For the 1D-QSAR model for E.coli cells, the total contribution of the parameters of the «liquid drop» is about 25%, from the characteristics of oxides, the main effect on cytotoxicity is given by the charge of the metal ion (more than 50%), the nature of the oxide plays a predominant role in the manifestation of cytotoxicity. Prediction of cytotoxicity against E. Coli bacteria for nanosized magnesium oxide was carried out. At the same time, the radius of individual MgO nanoparticles varied within the limits (from 15 to 150 nm) of the values of the radii of individual nanoparticles of other sample oxides, which were used to build the model, while MgO nanoparticles with a radius of 150 nm do not fall into the scope of the model. Heat treatment of $\text{Mg}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ was carried out at a temperature of 800°C in air, in vacuum and in argon. Using the IR spectroscopy method, it was established that heat treatment of $\text{Mg}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$ at 800°C in an argon atmosphere has the best result of MgO formation, modulation of the spectra of the samples obtained in the studied media is observed, which indicates the nanodispersity of the obtained product.

Індекс УДК: 615.1, 615.(014+015).26

Коди тематичних рубрик: 76.31.30

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Валіводзь Ірина Петрівна

Науковий ступінь: к. б. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: 1D-QSAR модель з відповідними статистичними параметрами; нанорозмірні зразки оксидних сполук магнію

Назва НТП англійською: 1D-QSAR model with appropriate statistical parameters; nanoscale samples of magnesium oxide compounds

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Фармацевтична галузь

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Побудовано 1D-QSAR модель з відповідними статистичними параметрами. В результаті проведення процедури Y-Scrambling отримано такі показники: $R^2(\text{scr}) = 0,30 \pm 0,04$ і $Q^2(\text{scr}) = 0,12 \pm 0,06$. Значну роль (65%) відіграють перехресні параметри різних пар дескрипторів, що свідчить про важливість впливу ефектів взаємодії різних чинників, які описують наночастинки. Для 1D-QSAR моделі щодо клітин E.coli загальний внесок параметрів «рідкої краплі» близько 25%, з характеристик безпосередньо оксидів основний вплив на цитотоксичність надає заряд йона металу (понад 50%), переважну роль у прояві цитотоксичності грає природа оксиду. Було проведено прогнозування цитотоксичності щодо бактерії E. Coli для нанорозмірного оксиду магнію, радіус індивідуальних наночастинок MgO варіювався в межах (від 15 до 150 нм) значень радіусів індивідуальних наночастинок інших оксидів вибірки, за якими була побудована модель, при цьому наночастинки MgO з радіусом 150 нм не потрапляють в область застосування моделі. Проведено термічну обробку $\text{Mg}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ при температурі 800°C на повітрі, у вакуумі та в аргоні. Методом ІЧ спектроскопії встановлено, що термообробка $\text{Mg}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$ при 800°C в атмосфері аргону має найкращий результат утворення MgO, спостерігається модуляція спектрів зразків отриманих у досліджуваних середовищах, що свідчить про нанодисперсність отриманого продукту.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 07.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Фармацевтична галузь

Перспективні ринки: Україна

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

Бабенко А.В., Валіводзь І.П. ІЧ спектроскопічне дослідження процесу розкладання гідроксокарбонату магнію / XXII Наукова молодіжна конференція «Проблеми та досягнення сучасної хімії», 14-15 вересня 2023 р., м. Одеса. С. 4.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

Д. Х. Н.

Перелік осіб-виконавців

Бабенко Антон Володимирович

Валіводзь Ірина Петрівна

(к. б. н., молодший науковий співробітник)

Стельмах Сергій Ігорович

Відповідальний за підготовку

Іллюшко Н. О.

облікових документів

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

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

