

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U003243

Державний реєстраційний номер: 0122U001972

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-06-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Моделі впливу зовнішніх факторів на фазові переходи та кінетичні процеси в нанорозмірних молекулярних системах.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього 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, 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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1039.942

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фазові переходи та кінетичні властивості молекулярних систем з просторовими нанонеоднорідностями, актуальних для екологічної безпеки і медицини

Назва роботи англійською:

Phase transitions and kinetic properties of molecular systems with spatial nanohomogeneities relevant to environmental safety and medicine

Реферат українською:

Актуальним є встановлення механізмів дії просторового обмеження та поверхневих ефектів на кінетичні процеси і фазові переходи в нанорозмірних молекулярних системах та створення їх молекулярних моделей. Метою роботи є встановлення закономірностей впливу просторових обмежень та взаємодії на межі нанорозмірне включення – макрооточення на параметри фазових переходів, релаксаційних процесів та кінетики переносу тепла і маси в просторово неоднорідних системах в цілому та у створенні фізичних моделей явищ, що спостерігаються, з врахуванням такого впливу. Основні завдання проекту: дослідити фазові перетворення та релаксаційні процеси в двокомпонентних матричних пористих системах з різними розмірами пор та хімічною будовою поверхні і запропонувати молекулярні моделі цих процесів; дослідити кінетичні властивості в системах полісахариди-вода і заміщені полісахариди-вода та створити їх молекулярні моделі; дослідити процеси формування температурних і термопружних збурень в гелях та шаруватих структурах на їх основі. Одна з ідей проекту полягає в тому, що в існуючій теорії фазових переходів першого роду суттєвим є досягнення критичного розміру зародка нової фази при наближенні до температури переходу. Якщо розмір просторових неоднорідностей (пор) є меншим цієї величини, то співіснування двох фаз в порі є сумнівним. Ми вважаємо, що в нанопорі речовина може існувати тільки в одній фазі, а фазовий перехід відбувається стрибком без виникнення критичного зародку.

Реферат англійською:

It is relevant to establish the mechanisms of action of spatial confinement and surface effects on kinetic processes and phase transitions in nanoscale molecular systems and to create their molecular models. The aim of the work is to establish the regularities of the influence of spatial confinement and interaction at the nanoscale inclusion-macroenvironment interface on the parameters of phase transitions, relaxation processes and kinetics of heat and mass transfer in spatially inhomogeneous systems in general and to create physical models of the observed phenomena, taking into account such influence. The main objectives of the project are: to investigate phase transformations and relaxation processes in two-component matrix porous systems with different pore sizes and surface chemical structure and to propose molecular models of these processes; to investigate the kinetic properties in polysaccharide-water and substituted polysaccharide-water systems and to create their molecular models; to investigate the processes of formation of temperature and thermoelastic perturbations in gels and layered structures based on them. One of the ideas of the project is that in the existing theory of phase transitions of the first kind it is essential to achieve a critical size of the nucleus of a new phase when approaching the transition temperature. If the size of spatial inhomogeneities (pores) is smaller than this value, then the coexistence of two phases in the pore is doubtful. We believe that in a nanopore a substance can exist in only one phase, and the phase transition occurs by a jump without the appearance of a critical nucleus.

Індекс УДК: 532; 533; 536; 538.9

Коди тематичних рубрик: 29.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:Лазаренко Максим Михайлович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Модельні уявлення процесу масопереносу розчинних барвників та лікарських препаратів

Назва НТП англійською: Model representations of the mass transfer process of soluble dyes and drugs

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Запропонована нова термодинамічна модель плавлення нанокристалів в оточенні твердої матриці яка дозволяє з експериментальних залежностей температури та теплоти плавлення нанокристалів від їх розміру розрахувати різницю поверхневих натягів та питомих поверхневих ентропій на границях «рідина-матриця» та «кристал-матриця», а також густину та величину внутрішнього тиску нанокристалу. Використовуючи цю модель на основі теплофізичних досліджень систем 1-октадецен-силікагель та ундеценова кислота-силікагель показано, що при слабкій взаємодії нанокристал-матриця (1-октадецен в матриці з поверхнею -ОН та ундеценова кислота в матриці з поверхнею - TMS) утворюються нанокристали для яких розраховані густина, величина внутрішнього тиску нанокристалів, різниця поверхневих натягів та питомих поверхневих ентропій на границях «рідина-матриця» та «кристал-матриця» мають незначні відхилення від значень для об'ємних кристалів. Запропоновані модельні уявлення для опису процесів (механізмів) переносу макромолекул різної природи, наночастинок та їх кон'югантів в полімерних гелях, які враховують вплив зовнішніх чинників (температури, властивостей розчиненої речовини та її концентрації) на основі створеного нового методу дослідження дифузії в гелях та кінетики вивільнення речовин з матриць різного складу та пористості. Розроблено модельні уявлення процесу масопереносу розчинних барвників та лікарських препаратів, а також їх кон'югатів та супрамолекулярних комплексів в шаруватих структурах на основі гелів. Запропоновано модель комплексного комбінованого шаруватого середовища на основі гелів з низкою шарів, що містять джерела депонованої цільової речовини, сорбенти, хелатоутворюючі речовини, антитіла та сенсibilізатори в різних комбінаціях для забезпечення керованої в просторі та часі доставки лікарських препаратів, добрив, зв'язування екологічно шкідливих речовин, тощо.

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних - 17; статті у наукових журналах, збірниках наукових праць, матеріалах конференцій тощо - 2; статті у фахових виданнях України категорії «А» - 9; публікації у матеріалах конференцій, тезах доповідей та виданнях, що не включені до переліку наукових фахових видань України -13; монографії та розділи монографій, опубліковані у закордонних виданнях мовами країн ОЕСР та/або ЄС - 4;

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна

д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Алексеев Сергій Олександрович

(д. х. н., 01.04.18)

Алексеев Олександр Миколайович

(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Андрусенко Дмитро Анатолійович

(к. ф.-м. н.)

Вергун Лена Юріївна

(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Гнатюк Катерина Іванівна

Ковальчук Валерій Інокентійович

(к. ф.-м. н.)

Огородник Катерина Олегівна

Сосновська Марія Олександрівна

Відповідальний за підготовку

Бурих А.А.

облікових документів

Телефон

+38 (044) 239-31-88

Реєстратор

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

