

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U002296

Державний реєстраційний номер: 0120U102176

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Дослідження структури та фізичних властивостей рідинних систем, актуальних для медицини, за допомогою експериментальних методів та методів комп'ютерного моделювання.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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

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 Перемоги, 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.): 1500.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фрактальна розмірність та властивості рідинних систем, актуальних для медицини та ядерних технологій.

Назва роботи англійською:

Fractal dimension and properties of fluid systems relevant to medicine and nuclear technology.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – Механізми утворення фрактальних агрегатів та впливу їх на рівноважні та кінетичні властивості рідинних систем. Мета роботи – визначення механізмів впливу фрактальних агрегатів на рівноважні та кінетичні фізичні властивості рідинної системи, з одного боку, та, з іншого боку, впливу термодинамічного стану рідинної системи на фрактальне кластероутворення. Методи дослідження – оптичні, малокутового розсіювання МКРН, МКРР, ДМКРН (VSANS), УМКРН (USANS), комп'ютерного моделювання, теоретикоаналітичні. За даними МКРН рідинних систем ТЕОС/вода/етанол виявлено збільшення розмірів силікатних агрегатів із зростанням відносного вмісту як води, так і ТЕОС, встановлено, що причиною цього є конформаційна різноманітність полімерних структур, які утворюються з гідролізованого ТЕОС в основних розчинах за рахунок механізму нуклеофільного заміщення. Спостережений за допомогою МКРН та МКРР структурний перехід від наноалмазних гідрозолів до гідрогелів має тиксотропію, яка пояснюється на основі багаторівневої фрактальної агрегації: на трьох характерних масштабах розміру, від нанометрів до мікрометрів, спостерігалася різна фрактальна розмірність, а отже і різна компактність гелевої сітки. Виявлено стабілізацію міцелярної системи молекулами водорозчинного полімеру ПЕГ за рахунок формування комплексів ПАР-полімер. Задля вирішення проблеми керованої доставки ліків за допомогою наночастинок із використанням методів МКРН, МКРР та ДРС встановлено механізм агрегації наночастинок та визначено умови стабілізації структури медикобіологічних рідинних систем, які містять наночастинок. Запропоновано структурну модель перебудови кластерів у МРС з розгалужених фрактальних до витягнутих ланцюгових у фізіологічному діапазоні температур та поза ним з урахуванням магнітної диполь-дипольної взаємодії частинок. Обґрунтовано вибір типу домішок, що сприяють стабілізації структури.

Реферат англійською:

Object of research - Mechanisms of formation of fractal aggregates and their influence on the equilibrium and kinetic properties of fluid systems. The aim of the work is to determine the mechanisms of influence of fractal aggregates on equilibrium and kinetic physical properties of liquid system, on the one hand, and, on the other hand, influence of thermodynamic state of liquid system on fractal cluster formation. Research methods - optical, low-angle scattering MKRN, MKRR, DMKRN (VSANS), UMKRN (USANS), computer modeling, theoretical and analytical. According to the ICR data of liquid systems TEOS / water / ethanol revealed an increase in the size of silicate aggregates with increasing relative content of both water and TEOS, it is established that the reason for this is the conformational diversity of polymer structures formed from hydrolyzed TEOS in basic solutions due to the mechanism of nucleophilic substitution. The structural transition from nanodiamond hydrosols to hydrogels observed with ICRN and ICRP has thixotropy, which is explained on the basis of multilevel fractal aggregation: on three characteristic scales of size, from nanometers to micrometers, different fractal dimensions were observed and therefore different compactness. Stabilization of the micellar system by molecules of water-soluble polymer PEG due to the formation of surfactant-polymer complexes was revealed. In order to solve the problem of controlled drug delivery using nanoparticles using the methods of ICRP, ICRP and DRS, the mechanism of nanoparticle aggregation was established and the conditions for stabilizing the structure of medicobiological liquid systems containing nanoparticles were determined. A structural model of cluster rearrangement in MRS from branched fractal to elongated chain in the physiological range of temperatures outside and outside it is proposed,

taking into account the magnetic dipole-dipole interaction of particles.

Індекс УДК: 532;533;536;538.9, 53.09

Коди тематичних рубрик: 29.17, 29.03.53

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Булавін Леонід Анатолійович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Вдосконалений метод

Назва НТП англійською: Advanced method

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Моделі та молекулярні механізми взаємовпливу наявності фрактальних субструктур і фізичної поведінки у конкретних різновидах рідинних систем.

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: За даними МКРН рідинних систем ТЕОС/вода/етанол виявлено збільшення розмірів силікатних агрегатів із зростанням відносного вмісту як води, так і ТЕОС, встановлено, що причиною цього є конформаційна різноманітність полімерних структур, які утворюються з гідролізованого ТЕОС в основних розчинах за рахунок механізму нуклеофільного заміщення. Спостережений за допомогою МКРН та МКРР структурний перехід від наноалмазних гідрозолів до гідрогелів має тиксотропію, яка пояснюється на основі багаторівневої фрактальної агрегації: на трьох характерних масштабах розміру, від нанометрів до мікрометрів, спостерігалася різна фрактальна розмірність, а отже і різна компактність гелевої сітки. Виявлено стабілізацію міцелярної системи молекулами водорозчинного полімеру ПЕГ за рахунок формування комплексів ПАР-полімер. Задля вирішення проблеми керованої доставки ліків за допомогою наночастинок із використанням методів МКРН, МКРР та ДРС встановлено механізм агрегації наночастинок та визначено умови стабілізації структури медикобіологічних рідинних систем, які містять наночастишки. Запропоновано структурну модель перебудови кластерів у МРС з розгалужених фрактальних до витягнутих ланцюгових у фізіологічному діапазоні температур та поза ним з урахуванням магнітної диполь-дипольної взаємодії частинок. Обґрунтовано вибір типу домішок, що сприяють стабілізації структури. За допомогою комп'ютерного моделювання визначено характеристики поверхні рідинної системи, що контактує з твердим тілом. Запропоновано вдосконалений метод, що дозволяє підвищити надійність комп'ютерного моделювання комплексів біологічно-активних молекул, які входять до складу лікарських препаратів. Запропоновано механізм виникнення нерівноважних флуктуацій в умовах зміни температури як передумов утворення фрактальної структури у біологічних розчинах.

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:

ІХ. Бібліографічний опис

2 монографії, 40 статей, 12 тез доповідей на наукових конференціях та 5 патентів і заявок на винахід.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна

д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Іваньков Олександр Ігорович

(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Алексеев Олександр Миколайович

(к.ф.-м.н., 01.04.14)

Артикульний Олександр Петрович

Бакуменко Марина Юріївна

Бур'ян Сергій Анатолійович

(к. ф.-м. н.)

Гаврюшенко Дмитро Анатолійович

(д.ф.-м.н., 01.04.14)

Голик Юрій Йосипович

Забашта Юрій Федосійович

(д. ф.-м. н., 01.04.14, 01.04.19)

Ковальчук Валерій Інокентійович

(к. ф.-м. н.)

Кондратюк Тетяна Олексіївна

(к. ф.-м. н.)

Косячкін Єгор Миколайович

Кузовков Юрій Гнатович

(к. ф.-м. н., 01.04.15)

Малярєнко Олена Євгеніївна

Нагорний Анатолій Васильович

(к. ф.-м. н.)

Ніколаєнко Тимофій Юрійович

(д. ф.-м. н.)

Огороднік Катерина Олегівна

Остапченко Сергій Григорович

Томчук Олександр Васильович

(к. ф.-м. н.)

Черевко Костянтин Володимирович

(д. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Бурих А.А.

Телефон

+38 (044) 239-31-88

Реєстратор

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

