

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U003435

Державний реєстраційний номер: 0119U100186

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-03-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Виготовлення розчинів і плівок нанокompозитів спряжених фулеренами C60 наносистем та проведення для них квантово-хімічних розрахунків електронної будови та оптичних переходів в емпіричному та в неемпіричному наближеннях.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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

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.): 1001.600

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Встановлення механізмів підвищення контактної електропровідності в радіаційно функціоналізованих полімерних композитах із п-спряженими модифікаторами.

Назва роботи англійською:

Installation of mechanisms for increasing contact electrical conductivity in radiation-functionalized polymer composites with n-conjugate modifiers.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – об'ємні та плівкові структуровані і радіаційно функціоналізовані полімерні композити, наповнені металевими частинками, вуглецевими нанотрубками та присадками з п-спряжених матеріалів. Мета роботи – Визначення фундаментальних закономірностей між поведінкою електропровідності, оптичного поглинання, фотолюмінесценції, ІЧ-поглинання, комбінаційного розсіяння світла, морфології, кристалічної структури, теплофізичних, діелектричних і механічних властивостей в окремих системах, що включають різні полімерні матриці, модифікатори, присадки, а також полімерних композитах, включаючи їх радіаційну функціоналізацію, проведення квантово-хімічного моделювання для встановлення в них механізмів підсилення тунельної провідності і виникнення фотосенсибілізації наповнювачів. Методи дослідження – структурні, оптичні, електропровідності, динамічний метод ультразвукових хвиль, електронного опромінення, комп'ютерного моделювання. Проведено дослідження перколяційних і фотосенсибілізаційних властивостей і в плівках нанокompозитів поліетиленгліколю (ПЕГ) і поліпропіленгліколю (ППГ) з багатостінними вуглецевими нанотрубками (БВНТ) та барвниками та спектрофотометричні дослідження концентраційних залежностей оптичних властивостей лікарських препаратів від вмісту лігандів. Встановлено, що в плівках полімерів поліетиленгліколю (ПЕГ) і поліпропіленгліколю (ППГ) з багатостінними вуглецевими нанотрубками (БВНТ) перколяційні криві електропровідності характеризуються малими значеннями порогів перколяції $\rho_{\text{ПЕГ-БВНТ}} = 0,0003$, $\rho_{\text{ППГ-БВНТ}} = 0,0002$ об. част., відповідно. Встановлено, що наявність кон'югації в нанокompозитах плівок ПЕГ-БВНТ, ППГ-БВНТ призводить до фотосенсибілізації сингулярностей Ван Хова вуглецевих нанотрубок.

Реферат англійською:

The object of research is three-dimensional and film structured and radiation-functionalized polymer composites filled with metal particles, carbon nanotubes and additives made of п-conjugate materials. Objective - To determine the fundamental laws between the behavior of electrical conductivity, optical absorption, photoluminescence, IR absorption, Raman scattering, morphology, crystal structure, thermophysical, dielectric and mechanical properties in individual systems, including various polymer matrices, my \additives, as well as polymer composites, including their radiation functionalization, quantum chemical modeling to establish mechanisms for enhancing tunneling conductivity and the occurrence of photosensitization of fillers. Research methods - structural, optical, electrical conductivity, dynamic method of ultrasonic waves, electronic irradiation, computer simulation. Percolation and photosensitization studies have been conducted properties and in the films of nanocomposites of polyethylene glycol (PEG) and polypropylene glycol (PPG) with multiwall carbon nanotubes (BVNT) and dyes and spectrophotometric studies of the concentration dependences of the optical properties of drugs on the content of ligands. It was found that in the films of polymers of polyethylene glycol (PEG) and polypropylene glycol (PPG) with multi-walled carbon nanotubes (BVNT) percolation conductivity curves characterized by small values of percolation thresholds $\rho_{\text{PEG-BVNT}} = 0.0003$, $\rho_{\text{PPG-BVNT}} = 0.0002$ vol. part., respectively. It was found that the presence of conjugation in the nanocomposites of PEG-BVNT and PPG-BVNT films leads to photosensitization of the Van Hov singularities of carbon nanotubes.

Коди тематичних рубрик:29.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Куліш Микола Полікарпович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Константи зв'язування для розчинів у воді

Назва НТП англійською: Binding constants for solutions in water

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Нові наукові дані

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проведено дослідження перколяційних і фотосенсибілізаційних властивостей і в плівках нанокompозитів поліетиленгліколю (ПЕГ) і поліпропіленгліколю (ППГ) з багатостінними вуглецевими нанотрубками (БВНТ) та барвниками та спектрофотометричні дослідження концентраційних залежностей оптичних властивостей лікарських препаратів від вмісту лігандів. Встановлено, що в плівках полімерів поліетиленгліколю (ПЕГ) і поліпропіленгліколю (ППГ) з багатостінними вуглецевими нанотрубками (БВНТ) перколяційні криві електропровідності характеризуються малими значеннями порогів перколяції $\sigma_{\text{ПЕГ-БВНТ}} = 0,0003$, $\sigma_{\text{ППГ-БВНТ}} = 0,0002$ об. част., відповідно. Встановлено, що наявність кон'югації в нанокompозитах плівок ПЕГ-БВНТ, ППГ-БВНТ призводить до фотосенсибілізації сингулярностей Ван Хофа вуглецевих нанотрубок. Отримано константи зв'язування для розчинів у воді молекул доксорубіцину і альбуміну за різних температур, розраховано зміни термодинамічних потенціалів, які вказують, що основними механізмами взаємодії вказаних молекул в комплексах є виникнення гідрофобних і електростатичних сил.

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

Статей в журналах, що індексуються БД Scopus та/або Web of Science Core Collection (WoS) - 18; англомовних статей та тез доповідей у матеріалах міжнародних конференцій, що індексуються БД Scopus або WoS - 9; статей у журналах, що входять до переліку фахових видань України - 10; монографій - 4; підручників, навчальних посібників, словників, довідників - 1; докторських і кандидатських (доктора філософії) дисертацій - 3; грантів - 1.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Александров Максим Андрійович

Булавін Леонід Анатолійович

(д. ф.-м. н., 01.04.14)

Гончаренко Надія Анатоліївна

Дмитренко Оксана Петрівна

(д. ф.-м. н., 01.04.07)

Забашта Юрій Федосійович

(д. ф.-м. н., 01.04.14, 01.04.19)

Курочка Лілія Іванівна

Місюра Андрій Іванович

Онанко Анатолій Петрович

(к. ф.-м. н.)

Павленко Олена Леонідівна

(д. ф.-м. н.)

Пінчук-Ругаль Тетяна Миколаївна

(к. ф.-м. н.)

Рожковський Олександр Миколайович

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

