

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0216U001284

Державний реєстраційний номер: 0113U002426

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-02-2016

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Моделювання та створення нанокон'югатів для фармацевтичного застосування

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2015

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 705 12 47, (057)705 02431

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон:

Внесок співвиконавця у звітний етап:

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 120.934
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Моделювання та створення нанокон'югатів для фармацевтичного застосування

Назва роботи англійською:

Modeling and creation nanokonyahativ for pharmaceutical

Реферат українською:

Мета роботи: пошук, прогнозування та створення супрамолекулярних комплексів, що мають направлену дію на окремі органи та тканини і несуть на собі речовини, що мають відповідний терапевтичний ефект. Методи дослідження: квантове та класичне молекулярно-динамічне (МД) моделювання, спектрофотометрія, рідинна хроматографія, спектроскопія протонного магнітного резонансу, рентгено-структурний аналіз. З використанням функціоналу вільної енергії електронів в рамках псевдопотенційної плоскохвильової теорії функціоналу густини вперше виконано моделювання електронних властивостей ВНТ, а також нанотрубок, що були функціоналізовані катіонами. Були передбачені різні залежності енергетичних та електронних властивостей для напівпровідникових та провідникових ВНТ з катіоном літію всередині. Вперше було встановлено, що введення катіону до центру напівпровідникової ВНТ з топологією зигзаг (26,0) призводить до виникнення діркової провідності у каркасі ВНТ за рахунок акцепторної МО літію.

Реферат англійською:

Objects of investigation: functionalized carbon nanotubes (CNT), gold (AuNPs) and silver (AgNPs) nanoparticle and their solutions, supramolecular complexes on the basis of d- and f-metals. The aim of this work is search, forecasting and creation of the supramolecular complexes having the directed action on separate bodies and fabrics with the substances which have the corresponding therapeutic effect. Methods of investigation: quantum and classical molecular dynamics (MD) simulation, spectrophotometry, liquid chromatography, spectroscopy of a proton magnetic resonance, X-ray diffraction analysis. With use of functional of free energy of electrons within the pseudo-potential plane wave density functional theory modelling the electronic properties of CNT and CNT functionalized by cations have been performed for the first time. Different dependences of energetic and electronic properties for semiconductor and conducting CNT with a lithium cation inside were predicted. It was established for the first time that introduction of a cation into the center of semiconducting CNT with topology zigzag (26,0) leads to appearance of hole conductivity in CNT framework due to acceptor MO of lithium.

Індекс УДК: 546;54-386, 544.354.

Коди тематичних рубрик: 31.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: В'юнник Іван Миколайович, Калугін Олег Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Супрамолекулярні комплекси, що мають направлену дію на окремі органи та тканини і несуть на собі речовини, що мають відповідний терапевтичний ефект.

Назва НТП англійською: The supramolecular complexes having the directed action on separate bodies and fabrics with the substances which have the corresponding therapeutic effect.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 73.10.0 Дослідження та розробки в галузі природничих та технічних наук про

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Пошук, прогнозування та створення супрамолекулярних комплексів, що мають направлену дію на окремі органи та тканини і несуть на собі речовини, що мають відповідний терапевтичний ефект.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2015-2018 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ВНЗ України, Фармацевтичні підприємства

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

Перелік осіб-виконавців

Агеєнко В.

В'юник І.

Калугін О.

Кириченко О.

Коваленко С.

Корсун О.

Рябчунова А.

Шитеєва Н.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

