

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U001460

Державний реєстраційний номер: 0116U000834

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-04-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНЕ І ТЕОРЕТИЧНЕ ВИВЧЕННЯ НАНОДИСПЕРСНИХ ТА ПОЛІМЕРНИХ СИСТЕМ, ПОВЕРХНЕВИХ ФІЗИКО-ХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СТВОРЕННЯ ЕЛЕКТРОХІМІЧНИХ СЕНСОРІВ

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітнього документа: Проміжний 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: (057) 7051247, (057)7050241

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 816.665
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Наносистеми та нановпорядковані матеріали: дизайн, фізико-хімічні характеристики, оптимізація умов використання у високих технологіях, медицині, аналізі.

Назва роботи англійською:

Nanosystems and nano-ordered materials: design, physic-chemical characteristics, optimization of application conditions in high technologies, medicine, and analysis

Реферат українською:

Мета роботи - вияснити закономірності коагуляції електролітами та взаємодії з органічними барвниками колоїдних частинок нанодіамантів та фуллерена C₆₀. Висвітлити особливості впливу органічних домішок на кислотно-основні взаємодії індикаторних барвників з аніонним поліелектролітом та поведінки таких барвників в водних розчинах катіонного поліелектроліту. Провести молекулярно-динамічне моделювання міцел іонних поверхнево-активних речовин і сольватохромного індикатора барвника в міцелах з подальшим співставленням з експериментальними спектральними даними. Одержати кількісні характеристики дисоціації серії флуоресцеїнових барвників в диметилсульфоксиді та ідентифікувати структури таутомерів цих сполук в розчинах. Оцінити можливість використання рівняння Девіса для адсорбційних шарів іонних поверхнево-активних речовин на межі поділу вода/повітря або вода/масло. Розробити нові квантово-хімічні методи дослідження спряжених полімерів на основі регуляризованих підходів теорії зв'язаних кластерів. Теоретично дослідити та сформулювати особливості масштабування властивостей дискретних випадкових мозаїк високої щільності у метриках, які визначаються кристалічними структурами підложок. Вивчення будови та морфологічної стабільності гострокутних наночастинок срібла. Дослідження спектральних та флуоресцентних властивостей індолінових барвників у молекулярному середовищі. Оцінка токсичної дії водної дисперсії нанотрубок при введенні щурам. Розробити електрохімічні сенсори на основі органо-кремнеземних матеріалів для визначення антиоксидантів. Одержані результати і новизна - вперше оцінено агрегативну стійкість сильно розведених гідрозолів детонаційних нанодіамантів по відношенню до електролітів, показано можливість розкладення катіон-аніонних асоціатів барвників під дією гідрозолів нанодіамантів, доведено сильну коагулюючу дію барвників на гідрозолі фуллерену C₆₀, особливо по відношенню до дії неорганічних електролітів. Вперше виявлено вплив органічних добавок на стан кислотно-основних рівноваг індикаторних барвників, зв'язаних макромолекулами поліелектроліту, а також висвітлено головні риси впливу катіонних поліелектролітів на аналогічні рівноваги. Проведене молекулярно-динамічне моделювання дозволило вперше теоретично оцінити локалізацію і гідратацію сольватохромного індикатора Райхардта в міцелах іонних поверхнево-активних речовин і підтвердити висновки, які раніше робилися, виходячи з спектрофотометричних вимірювань. Вперше одержано набір параметрів рівноваг, перш за все - термодинамічних констант дисоціації серії флуоресцеїнових барвників в диметилсульфоксиді, за допомогою спектрофотометричного та ІЧ-спектроскопічного методів вперше доведено створення лактонної структур моноаніону 5'-амінофлуоресцеїну в розчинах. Одержано нове рівняння стану для адсорбційних шарів іонних поверхнево-активних речовин на межі вода/флюїди; показано помилковість поширеного дотепер в літературі використання рівняння Девіса для цього випадку. Описано математичні і алгоритмічні основи розробленого програмного пакету для розрахунків спряжених полімерних систем. Описано також неемпіричні тести запропонованого раніше методу L1-регуляризації розв'язків рівнянь теорії зв'язаних кластерів. На прикладі двохатомної молекули F₂ аналізується будова хвильової функції і крива потенціальної енергії. Показано, що навіть при великих значеннях регуляризуючого параметру, коли розмір амплітудного набору значно скорочується, розрахунковий метод приводить до якісно коректного опису процесу дисоціації. Досліджено планарні дискретні розбиття зростання Пуассона-Вороного. Докладно описана структура границь. Поняття ребер Габрієля поширено на досліджуваний дискретний випадок. Статистичні

результати представлені для розбиття в цілому, а також для підмножин випадкових областей з заданим числом ребер. Усереднені відстані до сусідів у метриці, що визначається режимом зростання зародка, співставлено з Евклідовою метрикою. Лінійність по числу ребер виявлено для чотирьох характеристик, пов'язаних з масштабуванням. Виконано моделювання морфологічної стабільності наночастинок срібла, які склалися з 44-1156 атомів, що були стабілізовані полівініловим спиртом. Досліджені та проаналізовані спектральні та флуоресцентні властивості барвників D205, D149 та D102 у 16 різних молекулярних розчинниках. Встановлено, що введення водної дисперсії вуглецевих нанотрубок не чинить помітного впливу на стан і поведінку експериментальних шурів. Розроблені процедури електрохімічного визначення дофаміну та кверцетину дозволяють контролювати якість ліків, що містять дофамін та кверцетин як активні компоненти. Процедури характеризуються задовільними метрологічними характеристиками, та пройшли апробацію на реальних об'єктах.

Реферат англійською:

Aim of the study. This study is aimed to reveal the regularities of nanodiamonds and fullerene C₆₀ coagulation of colloidal particles via electrolytes and their interactions with organic dyes. Another aim is to elucidate the peculiarities of organic additives on the interaction of indicator dyes with an anionic polyelectrolyte and to examine the behavior of such indicators in cationic polyelectrolyte aqueous solutions. Molecular-dynamics modeling of ionic surfactant micelles was furthered by studying the locus and hydration of a solvatochromic dye in these pseudophases. Another target was to determine the quantitative parameters of dissociation of a series of fluorescein dyes in dimethylsulfoxide and to identify the structures of tautomers in solution. The possibility of application of the Davies equation to the ionic surfactant adlayers on water/air and water/hydrocarbon interfaces was examined and a modified equation was proposed. The development of new quantum-chemical methods of study of conjugated polymers based on the theory of coupled clusters was a purpose of theoretical part of the investigation. Another objective was the theoretical study and formulation of features of the scalable properties of discrete random dense tessellations in metrics that are determined by the crystal structures of the substrates. Also, the morphological stability of silver nanoparticles was investigated theoretically. Finally, experimental studies included the properties and fluorescent ability of indoline dyes in molecular environment, the evaluation of the toxicity of the nanocarbon tubes aqueous dispersion, and development of electrochemical sensors based on organo-silica materials for determination of antioxidants. Obtained results and their novelty. For the first time the aggregative stability of strongly diluted hydrosols of detonation nanodiamonds and fullerene was determined and quantitatively characterized, the dissociation of cation-anionic dye complexes in the presence of nanodiamonds is proved. The strong coagulative influence of cationic dyes on the fullerene hydrosol is confirmed. For the first time the influence of organic additives on the acid-base equilibria of indicator dyes in polyelectrolytic aqueous solution was quantitatively characterized. The differentiative influence of cationic polyelectrolytes on the protolytic properties of dyes was revealed. The molecular-dynamics simulation allowed revealing the locus of the solvatochromic Reichardt's dye in CTAB and SDS micelles and thus to confirm the experimental data concerning the hydration character of cationic and anionic surfactant micelles. For the first time the set thermodynamic dissociation constants of a series of fluorescein dyes in dimethylsulfoxide was determined via the spectrophotometric method; the vis- and infrared spectroscopy methods allowed to prove the lactonic structure of the monoanion of 5'-aminofluorescein. A new version of the equation of state of ionic surfactant in monolayers was proposed and the inapplicability of the Davies equation in its common form to the adlayers was demonstrated. The mathematical and algorithmic foundations of newly developed program package for calculations of conjugated polymeric systems have been described. Also the nonempirical L1-regularization approach to solution of coupled cluster equations which was developed recently has been tested. As an example the F₂ diatomic molecule wave function and corresponding potential energy curve were analyzed. It was demonstrated that even at large values of regularization parameter (when the number of amplitude significantly shrinking) the presented method leads to qualitatively correct description of dissociation process. Planar discrete Poisson-Voronoi tessellations have been investigated. The structure of the boundaries is described in detail. The concept of Gabriel edges is extended to

the discrete case under study. Statistical results are presented for the tessellation as a whole, as well as for subsets of random domains with a given number of edges. The averaged distances to neighbors in the metric, determined by the growth mode of nuclei, are compared with the Euclidean metric. Linearity in the number of edges is found for four scaling characteristics. The modeling of morphological stability of silver nanoparticles consisting of 44–1156 covered by polyvinyl alcohol was performed. The spectral and fluorescent properties of dyes D205, D149, and D102 were characterized in 16 organic solvents. The introduction of a suspension of carbon nanotubes displays no significant influence on the state and behavior of cats. The developed electrochemical procedures of 4-(2-aminoethyl)benzene-1,2-diol and quercetin determination allow to check the quality of the corresponding medicals. The analytical procedures were examined using real systems.

Індекс УДК: 546;54-386, 541.8

Коди тематичних рубрик: 31.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Мchedlov-Петросян Микола Отарович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Наносистеми та нановпорядковані матеріали

Назва НТП англійською: Nanosystems and nano-ordered materials

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.10.1 Дослідження і розробки у галузі природничих наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створити загальну схеми виникнення, стабілізації та руйнування розчинів фулеренів в "добрих" та "поганих" розчинниках, поширити уявлення щодо гідрозолів наноалмазів, виявити загальні риси у впливі розчинів ПАР, поліелектролітів, каліксаренів на стан солюбілізованих іонів та молекул, створити метод розрахунку корельованої хвильової функції ?-систем на основі теорії зв'язаних кластерів, реалізувати метод у вигляді комп'ютерної програми, проілюструвати можливості нового підходу до розрахунків електронної будови молекул; створити модель для аналізу зворотної зміни форми нанесених нанокаталізаторів в умовах хімічної реакції, реалізувати її у вигляді комп'ютерної програми, проілюструвати можливості й особливості моделі; одержати та визначити фізико-хімічні характеристики органо-кремнеземних матеріалів із прищепленими на поверхню групами амінофосфонові кислоти; розробити комп'ютерну модель для молекулярно-динамічного моделювання наночастинки срібла, що поверхнево стабілізована полівініловим спиртом; розробити н

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2017-2019 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ВНЗ України

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

1.Dinitrophenolsulfonephthalein: An acid-base indicator dye with unusual properties / N. O. Mchedlov-Petrosyan, A. N. Laguta, S. V. Shekhovtsov [et al.] // Coloration Technology. - 2017. - Vol. 133. - No. 2. -P. 135-144. <http://dx.doi.org/10.1111/cote.12254> 2.Formation and ageing of the fullerene C60 colloids in polar organic solvents / N. O. Mchedlov-Petrosyan, N. N. Kamneva, Y. T. M. Al-Shuuchi, A. I. Marynin, O. S. Zozulia // J. Mol. Liquids - 2017. - Vol. 235. -P. 98-103. <http://dx.doi.org/10.1016/j.molliq.2016.10.113> 3.Farafonov V. S. Developing and validating a set of all-atom potential models for sodium dodecyl sulfate / V. S. Farafonov, A. V. Lebed // J. Chem. Theory Comput. - 2017, Vol. 13, - No.6, - P. 2742-2750. <http://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.7b00181>

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

Перелік осіб-виконавців

Іванов В.

Вовчинський І.

Водолазька Н.

Гайденок НЕ.

Гога С.

Захаров А.

Камнева Н.

Кириченко О.

Коваленко С.

Коробов О.

Корсун О.

Лагута А.

Марфунін Н.

Мchedlov-Петросян М.

Никифорова О.

Ткаченко О.

Фарафонов В

Харченко А.

Чейпеш Т.

Шеховцов С.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

