

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U000858

Державний реєстраційний номер: 0122U001387

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-01-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Квантово-хімічний дизайн флуоресцентних лігандів здатних до комплексоутворення з іонами двовалентних металів. Синтез і дослідження будови напівпродуктів для конструювання цільових флуоресцентних лігандів.

Початок етапу: 02.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380577051247

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.): 1030.869

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Флуоресцентні гетероциклічні ліганди для зв'язування, аналізу та накопичення радіоактивних ізотопів двовалентних іонів металів

Назва роботи англійською:

Fluorescent heterocyclic ligands for binding, analysis and accumulation of radioactive isotopes of bivalent metal ions

Реферат українською:

Головна мета роботи – одержання флуорохромних лігандів для зв'язування іонів радіонуклідів в процесі їх накопичення екстракційним методом, причому утворення комплексів з іонами металів має приводити до зміни флуоресцентних характеристик ліганду. Кінцевою метою досліджень є розробка методу флуоресцентного контролю концентрування радіонуклідів перед радіометричним визначення їх активності.. Загальна фундаментальна проблема, на вирішення якої спрямовано НДР – розробка нового методичного підходу до аналізу радіонуклідів, що включає одночасне використання двох найчутливіших методів – флуоресцентної спектроскопії і радіометрії Перший етап дослідження – квантово-хімічний дизайн флуоресцентних лігандів здатних до комплексоутворення з іонами двовалентних металів, а також синтез і дослідження будови перспективних природних і нових флуоресцентних лігандів, а також їх напівпродуктів. На основі квантово-хімічних розрахунків була оцінена найбільш вірогідна структура комплексів флавонолів – одного з перспективних класів лігандів, що планується використати для зв'язування, концентрування і подальшого визначення двозарядних катіонів металів. Проаналізовано структуру полімерних матриць, що планується використовувати на кінцевій стадії концентрування для експрес- визначення радіонуклідів. Проведено синтези важливих природних і нових перспективних лігандів на основі систем хромену, флавону, похідних тіазолу і α - амінокислот.

Реферат англійською:

The main goal of the work is to obtain fluorochromic ligands for binding radionuclide ions in the process of their accumulation by the extraction method, and the formation of complexes with metal ions should lead to changes in the fluorescent characteristics of the ligand. The final goal of the research is the development of a new method of fluorescent control of the concentration of radionuclides before radiometric determination of their activity. The general fundamental problem, the solution of which is aimed at the researches, is the development of a new methodological approach to the analysis of radionuclides, which includes the simultaneous use of the two most sensitive methods – fluorescence spectroscopy and radiometry The first stage of the research is the quantum-chemical design of fluorescent ligands capable of complexing with divalent metal ions, as well as the synthesis and investigation of the structure of promising natural and new fluorescent ligands, as well as their semi- products. On the basis of quantum chemical calculations, the most likely structure of flavonol complexes – one of the promising classes of ligands, which is planned to be used for binding, concentration and further determination of doubly charged metal cations, was estimated. The structure of polymer matrices, which are planned to be used at the final stage of concentration for rapid determination of radionuclides, was analyzed, too. Syntheses of important natural and new promising ligands based on chromone, flavone, thiazole derivatives and α -amino acid systems have been carried out.

Індекс УДК: 543 , 54.027 + 543.064

Коди тематичних рубрик: 31.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:Рошаль Олександр Давидович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: квантово-хімічний дизайн флуоресцентних лігандів здатних до комплексоутворення з іонами двовалентних металів, а також синтез і дослідження будови перспективних природних і нових флуоресцентних лігандів, а також їх напівпродуктів.

Назва НТП англійською: The first stage of the research is the quantum-chemical design of fluorescent ligands capable of complexing with divalent metal ions, as well as the synthesis and investigation of the structure of promising natural and new fluorescent ligands, as well as their semi- products.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: органічна синтетична хімія, фармакологія, екологія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі квантово-хімічних розрахунків була оцінена найбільш вірогідна структура комплексів флавонолів – одного з перспективних класів лігандів, що планується використати для зв'язування, концентрування і подальшого визначення двозарядних катіонів металів. Проаналізовано структуру полімерних матриць, що планується використовувати на кінцевій стадії концентрування для експрес- визначення радіонуклідів. Проведено синтези важливих природних і нових перспективних

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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

1. Mishurov D., Voronkin A., Roshal A., Vashchenko O. Nonlinear activity and long-term stability of thin polymer films based on poly(3,5,7,3',4'-pentahydroxyflavone-8-sulfonic acid) sodium salt. // Polymers and Polymer Composites.- 2022.- V.30.- P. 1-8, <https://doi.org/10.1177/09673911211072978> (Scopus, Q3)
2. Dunaieva A., Mishurov D., Dukarov S., Roshal A.D. Impact of the acetone / DMSO binary solvent on porosity of epoxy polymer films // Functional Materials.- 2022. V.29.- P.537- 545. <https://doi.org/10.15407/fm29.04.537> . (Scopus, Q4)
3. Гладков Є.С., Рошаль О.Д., Демідов О.О., Манвелян А.А. Спосіб одержання заміщених 2-(3,4-дигідроксифеніл)-3-гідрокси-4Н-хромен-4-онів // Патент України №150472, C07D311/32, бюл. № 8, от 23.02.22.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Єфімова Наталія Віталіївна

Гладков Євгеній Станіславович

(к. х. н.)

Кириченко Олександр Васильович

(д. х. н., 07.00.02)

Коломойцев Олексій Олегович

Краснопьорова Алла Петрівна

(к. х. н., 02.00.04)

Рошаль Олександр Давидович

(к.х.н., 02.00.03)

Чейпеш Тетяна Олександрівна

(к. х. н.)

Юхно Галина Дмитрівна

(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку

Собран Н.В.

облікових документів

Телефон

+38 (066) 803-49-28

Реєстратор

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

