

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U001795

Державний реєстраційний номер: 0122U001972

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження впливу зовнішніх факторів на фазові переходи та кінетичні процеси в нанорозмірних молекулярних системах.

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): 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.): 1027.200

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фазові переходи та кінетичні властивості молекулярних систем з просторовими нанонеоднорідностями, актуальних для екологічної безпеки і медицини

Назва роботи англійською:

Phase transitions and kinetic properties of molecular systems with spatial nanohomogeneities relevant to environmental safety and medicine

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – Фазові переходи, релаксаційні процеси та явища переносу в системах з нанорозмірними просторовими неоднорідностями. Мета роботи – встановлення закономірностей впливу просторових обмежень та взаємодії на межі нанорозмірне включення – макрооточення на параметри фазових переходів, релаксаційних процесів та кінетики переносу тепла і маси в просторово неоднорідних системах в цілому та у створенні фізичних моделей явищ, що спостерігаються, з врахуванням такого впливу. Методи дослідження – теплофізичні, діелектричні, спектроскопічні, реологічні, структурні, теоретико-аналітичні. Показано, що 1-октадецен як в поруватій матриці з кремнію, так і в об'ємі кристалізується з орторомбічною підкоміркою, а ундеценова кислота в поруватій матриці з кремнію і в об'ємі кристалізується з різними підкомірками. Фазові переходи та релаксаційні процеси в наноструктурованих система пористий кремній – 1-октадецен та ундеценова кислота зміщуються в бік низьких температур та пов'язані з рухом топологічних солітонів вздовж аліфатичних ланцюгів. Ефект зниження температур переходів та зміни структури речовин в наноструктурованому стані може бути використаний для покращення біодоступності ліків. Встановлено, що молекули води можуть вбудовуватись в кристалічні області целюлозних матеріалів у кількості, по порядку величини, порівнянню з кількістю молекул води, що вбудовуються в аморфні області. Показано, що релаксаційний процес в системах наноцелюлоза-вода пов'язаний з поверхневими шарами частинок наноцелюлози, які оточені гідратною оболонкою, а механізм діелектричної релаксації пов'язаний з переорієнтацією поверхневих метилольних груп молекули целюлози шляхом зміни їх конформацій із tg на tt . Встановлено, що в заміщених целюлозах (НРС, НРМС) зменшується інтенсивність релаксаційного процесу та він зсувається в область високих температур.

Реферат англійською:

Research object – Phase transitions, relaxation processes and transport phenomena in systems with nanoscale spatial inhomogeneities. The purpose of the work is to establish the regularities of the influence of spatial restrictions and interaction at the nanoscale inclusion-macroenvironment boundary on the parameters of phase transitions, relaxation processes, and the kinetics of heat and mass transfer in spatially heterogeneous systems as a whole and to create physical models of the observed phenomena, taking into account such influence. Research methods are thermophysical, dielectric, spectroscopic, rheological, structural, theoretical and analytical. It is shown that 1-octadecene both in the porous silicon matrix and in the bulk crystallizes with an orthorhombic subcell, while undecenoic acid in the porous silicon matrix and in the bulk crystallizes with different subcells. Phase transitions and relaxation processes in the nanostructured system porous silicon – 1-octadecene and undecenoic acid are shifted toward low temperatures and are associated with the movement of topological solitons along aliphatic chains. The effect of lowering transition temperatures and changing the structure of substances in a nanostructured state can be used to improve the bioavailability of drugs. It has been established that water molecules can be embedded in the crystalline regions of cellulosic materials in an order of magnitude comparable to the number of water molecules embedded in amorphous regions. It is shown that the relaxation process in nanocellulose-water systems is related to the surface layers of nanocellulose particles, which are surrounded by a hydrate shell, and the mechanism of dielectric relaxation is related to the reorientation of the

surface methylol groups of the cellulose molecule by changing their conformations from tg to tt.

Індекс УДК: 532; 533; 536; 538.9

Коди тематичних рубрик: 29.17

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лазаренко Максим Михайлович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Метод діелектричної спектроскопії.

Назва НТП англійською: Dielectric spectroscopy method.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Моделі впливу різних зовнішніх фізичних факторів

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Показано, що 1-октадецен як в поруватій матриці з кремнію, так і в об'ємі кристалізується з орторомбічною підкоміркою, а ундеценова кислота в поруватій матриці з кремнію і в об'ємі кристалізується з різними підкомірками. Фазові переходи та релаксаційні процеси в наноструктурованих системах пористий кремній – 1-октадецен та ундеценова кислота зміщуються в бік низьких температур та пов'язані з рухом топологічних солітонів вздовж аліфатичних ланцюгів. Ефект зниження температур переходів та зміни структури речовин в наноструктурованому стані може бути використаний для покращення біодоступності ліків. Встановлено, що молекули води можуть вбудовуватись в кристалічні області целюлозних матеріалів у кількості, по порядку величини, порівнянному з кількістю молекул води, що вбудовуються в аморфні області. Показано, що релаксаційний процес в системах наноцелюлоза-вода пов'язаний з поверхневими шарами частинок наноцелюлози, які оточені гідратною оболонкою, а механізм діелектричної релаксації пов'язаний з переорієнтацією поверхневих метилольних груп молекули целюлози шляхом зміни їх конформацій із tg на tt. Встановлено, що в заміщених целюлозах (НРС, НРМС) зменшується інтенсивність релаксаційного процесу та він зсувається в область високих температур. Це пов'язано з тим, що при заміщенні гідрокси груп гідроксипропокси групами їх конформаційний рух вносить вклад в діелектричну релаксацію при вищих температурах, а ніж конформаційний рух метилольних груп. Показано, що метод діелектричної спектроскопії може бути застосований для оцінки ступеня заміщення гідроксильних груп на гідроксипропокси групи в молекулах заміщених целюлоз, яка використовується у фармацевтичній промисловості як носій лікарських препаратів та регулятор швидкості їх вивільнення при адресній доставці в людському організмі. Розроблений методу вимірювання коефіцієнту теплопровідності поруватих матеріалів та композитних систем на їх основі.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища

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

Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 11; публікації в матеріалах конференцій, що входять до наукометричних баз даних Scopus та/або Web of Science (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 1; статті у журналах, що включені до переліку наукових фахових видань України - 5;

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Алексеев Олександр Миколайович
(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Андрусенко Дмитро Анатолійович
(к. ф.-м. н.)

Британ Андрій Васильович
(к. ф.-м. н.)

Вергун Лена Юріївна
(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Гнатюк Катерина Іванівна

Ковальчук Валерій Інокентійович
(к. ф.-м. н.)

Огороднік Катерина Олегівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Катасонова В.В.

Телефон

+38 (044) 239-31-88

Реєстратор

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

