Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U000926

Державний реєстраційний номер: 0122U001485

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-01-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Біосумісні золі, іонні рідини, кластери, фотоелектричні перетворювачи світлової енергії.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 959.970

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дизайн та оптимізація функціональних нанодисперсних систем: ліофільні агрегати, біосумісні золі, гібридні матеріали, фотоелектричні перетворювачи

Назва роботи англійською:

Design and optimization of functional nanodisperse systems: lyophilic aggregates, biocompatible sols, hybrid materials, photovoltaic converters

Реферат українською:

За допомогою молекулярно-динамчіного моделюванням оцінено характер агрегації іонів додецилсульфату та цетилтриметиламонію в воді без участі протиіонів. Встановлено характер орієнтації сольватохромних індикаторів Райхардта в міцелах ПАР, а також ацетату і пальмітату 4-нітрофенолу в агрегатах калікс[4]арену. Визначено pK a серії нітрофлуоресцеїнів в ДМСО та розглянуто таутомерної рівноваги аніонів цих барвників. Вперше синтезовано, ідентифіковано та охарактеризовано 3'-нітрофлуоресцеїн та 3'-амінофлуоресцеїн. Показано, що основним фактором управління у разі регулярного масиву фрустрованих малих кластерів є забезпечення оптимального ступеня покриття підложки. Синтезовано та досліджено стаціонарні спектри поглинання, випромінювання та збудження, а також спектроскопічні характеристики 3-периленкарбонітрилу (PeCN) з роздільною здатістю в часі. Дослідження показало, що PeCN має оптимальні характеристики для спектроскопічного використання, в тому числі, як барвника-сенсибілізатора для СЕСБ.З використанням методу молекулярно-динамічного моделювання досліджено вплив pH на структурно-динамічні характеристики полімерних наночастинок на основі наночастинок срібла та блок-кополімерів типу PMMA20-b-PDMAEMA20. встановлено основні закономірності поведінки цих систем.

Реферат англійською:

Using molecular dynamics modeling, the nature of aggregation of dodecyl sulfate and cetyltrimethylammonium ions in water without the participation of counterions was evaluated. The orientation of Reichardt's solvatochromic indicators in surfactant micelles, as well as 4-nitrophenol acetate and palmitate in calix[4]arene aggregates, was determined. The pK a of a series of nitrofluoresceins in DMSO was determined and the tautomeric equilibrium of the anions of these dyes was considered. 3'-nitrofluorescein and 3'-aminofluorescein were synthesized, identified and characterized for the first time. It is shown that the main management factor in the case of a regular array of frustrated small clusters is ensuring the optimal degree of substrate coverage. Steady-state absorption, emission, and excitation spectra as well as time-resolved spectroscopic characteristics of 3-perylenecarbonitrile (PeCN) were synthesized and investigated. The study showed that PeCN has optimal characteristics for spectroscopic use, including as a sensitizing dye for SEBS. Using the method of molecular dynamic modeling, the influence of pH on the structural and dynamic characteristics of polymer nanoparticles based on silver nanoparticles and block copolymers of the PMMA20-b-PDMAEMA20 type was investigated. Based on the results of molecular dynamic modeling of the local structure around coumarin C153 in mixtures of 1-butyl-3-methylimidazolium terafluoroborate with propylene carbonate, the main patterns of behavior of these systems were established.

Індекс УДК: 66, 544.354+544.77.022.532

Коди тематичних рубрик: 61

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання:професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Молекулярно-динамічне моделювання іонів ПАР

Назва НТП англійською: Molecular dynamics modeling of surfactant ions

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Фізична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Головним результатом молекулярно-динамічного моделювання є встановлення задовільного узгодження значень □ , одержаних теоретично та експериментально з фіксованим індикатором. У той же час, для різних індикаторів ці величини суттєво розбігаються.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Mchedlov-Petrossyan N.O., Farafonov V.S., Lebed A.V. Solvatochromic and Acid–Base Molecular Probes in Surfactant Micelles: Comparison of Molecular Dynamics Simulation with the Experiment (a Review). Liquids 2023, 3, 314–370, https://doi.org/10.3390/liquids3030021

Vodolazkaya N., Laguta A., Farafonov V., Nikolskaya M., Balklava Z., Khayat R., Stich M., Mchedlov-Petrossyan N., Nerukh D. Influence of various colloidal surfactants on the stability of MS2 bacteriophage suspension. The charge distribution on the PCV2 virus surface. J. Mol. Liquids 2023, 387, 122644 https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122644

Mchedlov-Petrossyan N. O., Cheipesh T. A., Moskaeva E. G., Shekhovtsov S. V., Ostrovskyi K. I. Towards understanding of stepwise acid-base dissociation in systems inclined to tautomerism: Nitro derivatives of fluorescein in dimethyl sulfoxide. J. Mol. Liquids, 2023, 386, 122540. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.122540

Shekhovtsov S. V., Omelchenko I. V., Shishkina S. V., Doroshenko A. O., Vus K. O., Vlasenko H. S., Mchedlov-Petrossyan N. O. 3п-Nitro- and 3п-aminofluoresceins: Appearance of previously missing dyes. Colorants, 2023, 2, 500–518. https://doi.org/10.3390/colorants2030024

Smortsova Y., Miannay F.-A., Kalugin O., Takamuku T., Idrissi A. Effect of the mixture composition of BmimBF4/PC on the solvation structure of C153 in as seen from molecular dynamics study. J. Mol. Liq. 2023, 390, 123015. https://doi.org/ 10.1016/j.molliq.2023.123015.

Moskaieva O., Lebedev M., Smortsova Y., Molchanov E., Dubois J., Kalugin O., Marfin Y., Idrissi A., Miannay F.-A. Conformational effect on the photophysics of two BODIPY dyes in a mixture of butanol and acetonitrile: Insight from the steady-state, fluorescence time- resolved spectroscopy and TD-DFT calculations. J. Mol. Liq. 2023, 382, 12187. https://doi.org/ 10.1016/j.molliq.2023.121877 .

Prud, M. V.; Kyrychenko, A.; Kalugin, O. N. pH-controllable coating of silver nanoparticles with PMMA-b-PDMAEMA oligomers: A molecular dynamics simulation study. J. Phys. Chem. C 2023, 127, 11748–11759. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c02779

Пантелеймонов А. В., Анохін Д. О., Іванов В. В. Робастне оцінювання параметрів регресій. Теорія нечіткості та інші моделі. Вісник Харківського національного університету, серія "Хімія". 2022, вип. 38 (61), 6-15. https://doi.org/10.26565/2220- 637X-2022-38-01

Vaksler Y., Hryhoriv H. V., Ivanov V. V., Kovalenko S. M., Georgiyants V. A. and Langer T. Synthesis, analysis of molecular and crystal structures, estimation of intermolecular interactions and biological properties of 1-benzyl-6-fluoro-3-[5-(4-methylcyclohexyl)-1,2,4- oxadiazol-3-yl]-7-(piperidin-1-yl) quinolin-4-one. Acta Cryst. 2023, E79, 192–200. https://doi.org/10.1107/S2056989023001305

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Катрич Віктор Олександрович
д. ф.-м. н.

Перелік осіб-виконавців

Іванов Володимир Венедиктович
(д.х.н., 02.00.04)

Гога Сергій Тарасович
(к. х. н.)

Калугін Олег Миколайович
(к.х.н., 02.00.04)

Кириченко Олександр Васильович
(д. х. н., 07.00.02)

Коваленко Сергій Миколайович
(д. х. н., 15.00.02)

Коробов Олександр Ісаакович
(д. х. н., 02.00.04)

Мчедлов-Петросян Микола Отарович
(д.х.н., 02.00.04)

Христенко Інна Василівна

Черножук Тетяна Василівна

Шаповалов Сергій Андрійович
(д. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Собран Н.

Телефон +38 (066) 803-49-28

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

