Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U001103

Державний реєстраційний номер: 0120U102174

Відкрита

Дата реєстрації: 25-01-2023

1. Етапи виконання

Номер етапу: 3

Назва етапу: Побудова теорії та числове моделювання процесів взаємодії електромагнітних хвиль з керованими рідким кристалом наноструктурами, що містять плівки матеріалів з керованими діелектричними характеристиками, тонкі плівки оксидів та нітридів металів та неметалів, а також рідкокристалічні еластомери.

Початок етапу: 01-2022

Закінчення етапу: 12-2022

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02070944

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Телефон: 380442393333

E-mail: office.chief@univ.net.ua

WWW: http://www.univ.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

Телефон: +380444813221

Телефон: mon@mon.gov.ua

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: https://mon.gov.ua/ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 963.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Моделювання оптичних властивостей гібридних органічно-неорганічних плазмонних нано-структур для застосувань у біо- та нано-фотоніці.

Назва роботи (англ)

Modeling of optical properties of hybrid organic-inorganic plasmonic nano-structures for applications in bio- and nano-photonics.

Реферат (укр)

Об'єкт дослідження: наноструктури білкового та нуклеїнового типу, білкова молекула, електронна підсистема білків, азотно-киснева модель, білковоподібні нанодроти, молекула ДНК, поліпептидні фрагменти білкових молекул, питома провідність. Мета роботи: отримання нових знань про відгуки досліджуваних конденсованих середовищ органічного походження на дію електромагнітних полів та термічних впливів для прогнозування їх фізичних властивостей, корисних при створенні та застосуванні сенсорів, зокрема, сенсорів на плазмонному резонансі, біосенсорів. Методи дослідження: теоретичний та математичний аналіз даних, порівняння з експериментом, аналітично-числове моделювання. Встановлено існування у білковій молекулі напрямленого електростатичного поля за відсутності зовнішнього поля. Воно пов'язане з неоднорідним характером системи, яка обумовлена радикалами в амінокислотах, що утворюють білок і забезпечує наноструми. Показано, що первинна структура білкової молекули можне розглядатися як напівпровідниковий нанодріт. Проаналізована залежність розрахованих станів провідності від ефективного електростатичного поля. Показано, що зі збільшенням величини поля стани провідності зміщуються в бік зменшення енергії. Побудовано та обґрунтовано теоретичну модель переносу електрона через зону провідності білковоподібних нанодротів в реальних температурних умовах. Досліджена можливість керування переносом електронів по білковоподібному нанодроту, як складової метаболічного процесу. Розглянуто вплив магнітного поля на перенос електрона по білковому нанодроту. Встановлені умови, при яких вплив магнітного поля є позитивним, а при яких синтез АТФ може блокуватись. Розглянуто молекулярний ланцюжок ДНК із врахуванням детальної будови нуклеотидної пари у якості одного з каналів переносу електрона у метаболічному процесі. Показано, що можливість переносу електрона між полінуклеотидними ланцюгами значно менша ніж вздовж ланцюгів.

Реферат (англ)

Research object: protein and nucleic type nanostructures, protein molecule, electronic subsystem of proteins, nitrogen-oxygen model, protein-like nanowires, DNA molecule, polypeptide fragments of protein molecules, specific conductivity. The purpose of the work: obtaining new knowledge about the responses of the investigated condensed mediums of organic origin to the action of electromagnetic fields and thermal influences in order to predict their physical properties, useful in the creation and application of sensors, in particular, sensors based on plasmon resonance, biosensors. Research methods: theoretical and mathematical data analysis, comparison with experiment, analytical and numerical modeling. The existence of a directed electrostatic field in a protein molecule in the absence of an external field has been established. It is related to the inhomogeneous nature of the system, which is due to the radicals in the amino acids that form the protein and provides the nanocurrent. It is shown that the primary structure of a protein molecule can be considered as a semiconductor nanowire. The dependence of the calculated conduction states on the effective electrostatic field is analyzed. It is shown that with an increase in the magnitude of the field, the conduction states shift in the direction of decreasing energy. A theoretical model of electron transfer through the conduction zone of protein-like nanowires under real temperature conditions has been constructed and substantiated. The possibility of controlling the transfer of electrons along a protein-like nanowire as a component of the

metabolic process was investigated. The influence of the magnetic field on the electron transfer along the protein nanowire is considered. The conditions under which the influence of the magnetic field is positive and under which ATP synthesis can be blocked have been established.

Індекс УДК: 533.9, 535;539.183/.184;681.7;77

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.27, 29.31

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Існування у білковій молекулі напрямленого електростатичного поля за відсутності зовнішнього поля.

Назва продукції (англ): The existence of a directed electrostatic field in a protein molecule in the absence of an external field.

Очікувані результати: Рекомендації для застосування результатів в технологіях виготовлення керованих рідким кристалом нових типів гібридних плазмонних наноструктур.

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Опис продукції (укр): Встановлено існування у білковій молекулі напрямленого електростатичного поля за відсутності зовнішнього поля. Воно пов'язане з неоднорідним характером системи, яка обумовлена радикалами в амінокислотах, що утворюють білок і забезпечує нанострум. Показано, що первинна структура білкової молекули можне розглядатися як напівпровідниковий нанодріт. Проаналізована залежність розрахованих станів провідності від ефективного електростатичного поля. Показано, що зі збільшенням величини поля стани провідності зміщуються в бік зменшення енергії. Побудовано та обґрунтовано теоретичну модель переносу електрона через зону провідності білковоподібних нанодротів в реальних температурних умовах. Досліджена можливість керування переносом електронів по білковоподібному нанодроту, як складової метаболічного процесу. Розглянуто вплив магнітного поля на перенос електрона по білковому нанодроту. Встановлені умови, при яких вплив магнітного поля є позитивним, а при яких синтез АТФ може блокуватись. Розглянуто молекулярний ланцюжок ДНК із врахуванням детальної будови нуклеотидної пари у якості одного з каналів переносу електрона у метаболічному процесі. Показано, що можливість переносу електрона між полінуклеотидними ланцюгами значно менша ніж вздовж ланцюгів. Встановлено, що питома провідність ДНК не є константою, як у звичайних провідників, а зменшується із збільшенням довжини ланцюга.

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

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Київський національний університете імені Тараса Шевченка

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Статей в журналах, що індексуються БД Scopus та/або Web of Science Core Collection (WoS) (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 18; англомовних статей та тез доповідей у матеріалах міжнародних конференцій, що індексуються БД Scopus або WoS (або Index Copernicus для соціо-гуманітарних наук) - 8; статей у журналах, що входять до переліку фахових видань України - 20; монографій - 9; підручників, навчальних посібників, словників, довідників - 1;

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 109

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Атамась Наталія Олексіївна (д. ф.-м. н., пров.н.с.)

Бєлих Світлана Петрівна (к. ф.-м. н.)

Дацюк Віталій Васильович (д. ф.-м. н., професор)

Задорожний Віктор Іванович (к. ф.-м. н., с.н.с.)

Науменко Світлана Миколаївна

Пінкевич Ігор Павлович (д. ф.-м. н., професор)

Супрун Анатолій Дмитрович (к. ф.-м. н., с.н.с.)

Шмельова Людмила Володимирівна (к. ф.-м. н., ст. наук .співр.)

Щербаков Крістіан Меселе (к. ф.-м. н.)

Керівник організації:

Толстанова Ганна Миколаївна (д. б. н., професор)

Керівники роботи:

Решетняк Віктор Юрійович (д. ф.-м. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.