

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0212U005798

Державний реєстраційний номер: 0112U005314

Відкрита

Дата реєстрації: 28-12-2012



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Мембрани-біоміметики: новий підхід до нанофільтрації.

Початок етапу: 08-2012

Закінчення етапу: 12-2012

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут фізики НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417302

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 03680, МСП, м.Київ, проспект Науки, 46

Телефон: 525-12-20

E-mail: fizyka@iop.kiev.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут фізики Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417302

Адреса: проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03680, Україна

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445251220

Телефон: 380445251589

E-mail: fizyka@iop.kiev.ua

WWW: <http://www.iop.kiev.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: 2209080

Напрямок фінансування: 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 – кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 35 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Мембрани-біоміметики: новий підхід до нанофільтрації.

Назва роботи (англ)

Membranes-biomimetics: new approach to nanofiltration.

Реферат (укр)

Об'єктом дослідження є мембрани-біоміметики та одностінні вуглецеві нанотрубки. Метою дослідження є теоретичне вивчення транспорту іонів та нуклеотидів крізь одностінні вуглецеві нанотрубки. Основними результатами досліджень є такі: визначено профілі умовної вільної енергії для проникаючих іонів у порах одностінних вуглецевих нанотрубок на основі даних, отриманих методом молекулярної динаміки. Створено моделі нанотрубок зі стінками, що поляризуються, для досліджень методом молекулярної динаміки. Створено спрощену модель спільної провідності іонів та нуклеотидів у порах одностінних вуглецевих нанотрубок. Результати дослідження носять фундаментальний характер та можуть використовуватися у галузях біофізики та біонанотехнології.

Реферат (англ)

The membranes-biomimetics and the single-wall carbon nanotubes are studied. The goal of the study is theoretical investigation of the transport of ions and nucleotides through the single-wall carbon nanotubes. The major scientific results of the study are the following: the free energy profiles for permeating ions in the single-wall carbon nanotubes are obtained based on data of molecular dynamics simulations. The models of the nanotubes with polarizable walls are created for molecular dynamics simulations. The simplified model of joint diffusion of ions and nucleotides in the single-wall carbon nanotubes is created. The results are fundamental and could be used in the areas of biophysics and bionanotechnology.

Індекс УДК: 536.516, 538.935, 538.941, 577.352.2; 577.352.3; 577.3.01; 577.38; 577.3.001.57.

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.17.

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Модель сумісної провідності іонів та нуклеотидів у порах одностінних вуглецевих нанотрубок іонних каналів, що вбудовані у мембрани-біоміметики на основі даних, отриманих методом молекулярної динаміки.

Назва продукції (англ): The model of joint conduction of ions and nucleotides in the pores of single-wall carbon nanotubes embedded into the membranes-biomimetics based on trajectories of molecular dynamics simulations.

Очікувані результати:

Галузь застосування: 72.1 Дослідження та експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Опис продукції (укр): Розроблено модель сумісної провідності іонів та нуклеотидів у порах одностінних вуглецевих нанотрубок іонних каналів, що вбудовані у мембрани-біоміметики на основі даних, отриманих методом молекулярної динаміки.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 2-3 роки.

Виробник продукції: Інститут фізики НАН України

Споживачі продукції: науково-дослідні інститути.

Перспективні ринки: Україна, зарубіжні країни.

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Yesylevskyy S.O. Pteros: fast and easy to use open-source C++ library for molecular analysis // J Comput Chem. 2012 Jul 15;33(19):1632-1636.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 44

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Єсилевський Семен Олександрович

Харкянен Валерій Миколайович

Керівник організації:

Яценко Леонід Петрович

Керівники роботи:

Харкянен Валерій Миколайович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.