



ІННОВАЦІЙНО-ОРІЄНТОВАНІ ПРОЕКТИ



Запропонована база даних містить анотовані звіти завершених науково-дослідних проектів Державного фонду фундаментальних досліджень (ДФФД), які за експертними висновками членів Ради Фонду доведені до певного рівня практичного втілення, тобто розглядаються як інноваційно-орієнтовані.

ПРОЕКТ № Ф40.1/004

ІНТЕГРОВАНІЙ ПІДХІД ДО АНАЛІЗУ ТА ВЕРИФІКАЦІЇ СПЕЦИФІКАЦІЙ ТЕЛЕКОМУНІКАЦІЙНИХ ПРОГРАМНИХ ЗАСОБІВ ДЛЯ ОДНОПРОЦЕСОРНИХ ТА БАГАТОПРОЦЕСОРНИХ СИСТЕМ

Керівник проекту: *Летичевський О.А.*

Мета проекту — розробка інтегрованого підходу до аналізу та верифікації програмного забезпечення телекомунікаційних систем на основі формальних методів із застосуванням засобів автоматичної дедукції, інсерційного моделювання та перевірки моделей. Розроблено методи аналізу та верифікації для специфікацій телекомунікаційних систем, поданих у термінах імперативних послідовних та паралельних програм, а також у термінах систем базових протоколів та MSC-діаграм. Основні етапи досліджень включили розробку інсерційних моделей багаторівневих протоколів та програм телекомунікаційних систем, розробку дедуктивних методів верифікації протоколів та програм над структурами даних, а також підготовку та проведення експериментів у системі інсерційного моделювання, розробленій у Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова НАНУ. Створено прототипи програмних засобів для аналізу та верифікації специфікацій.

Результати роботи подані у доповідях на конференціях, публікаціях, наукових звітах.

ПРОЕКТ № Ф40.1/043

РОЗРОБКА ІНДЕКСІВ ТА ІНДИКАТОРІВ СТАЛОГО РОЗВИТКУ РЕГІОНІВ РОСІЇ ТА УКРАЇНИ НА ОСНОВІ КОМБІНОВАНОГО ВИКОРИСТАННЯ ПРИЧИННО-НАСЛІДКОВИХ ТА ІМОВІРНІСНИХ СЕМАНТИК

Керівник проекту: *Згуровський М.З.*

Отримано результати дослідження факторів загроз та ризиків складних антропогенних систем в глобальних і регіональних контекстах для подальшого створення інформаційного ресурсу на базі СЦД-Україна. Підхід, який використовується в цьому дослідженні, передбачає розгляд розвитку

Російської Федерації та України з позицій забезпечення стійкості та збалансованості за трьома вимірами: *економічним, екологічним та соціально-інституціональним*. Системне узгодження і баланс трьох вказаних вимірів – це стратегічне завдання. Його вирішення є найголовнішим викликом сьогодення для національних урядів, авторитетних міжнародних організацій та всіх прогресивних людей світу. Виконання проекту спрямовано на вирішення фундаментальної наукової проблеми створення системи індексів та індикаторів, які характеризують сталий розвиток територій, що дасть можливість особам, які приймають рішення, обґрунтовувати ту чи іншу стратегію та подальші соціально-економічні плани розвитку. В цьому напрямі проведено оцінювання рівня небезпеки загроз сталому розвитку в регіонах України із застосуванням розробленої методики оцінки узгодженості даних експертного оцінювання. Дослідження проводиться в рамках діяльності Світової системи даних Міжнародної Ради з науки.

ПРОЕКТ № Ф40.2/023

**ФОКУСУВАННЯ ІНТЕНСИВНИХ ПУЧКІВ НЕГАТИВНО ЗАРЯДЖЕНИХ
ЧАСТИНОК ЕЛЕКТРОСТАТИЧНОЮ ПЛАЗМОВОЮ ЛІНЗОЮ**

Керівник проекту: *Гончаров О.А.*

Розроблено та виготовлено новий вдосконалений макет лінзи з просторовим зарядом на іонах додатного знаку. Створено макет джерела для отримання пучків від'ємно заряджених частинок та отримано пучки електронів та іонів з від'ємним знаком заряду. Експериментально отримано збільшення густини струму на осі широкоапертурного електронного пучка у 1,8 рази. Експериментально показано, що провал потенціалу на осі нового макету лінзи відсутній. Отже, аберації в лінзі суттєво зменшені. Експериментально показано, що плазма хмари об'ємного заряду стабілізує роботу джерела електронів та разом з фокусуєчими можливостями лінзи дозволяє стиснути 100-амперний, широко апертурний (початковий діаметр 6 см) пучок до розміру 1 см та отримати густину струму пучка, більшу за 100 А/см². Розроблено чисельну модель процесу фокусування пучків частинок з від'ємним знаком заряду в електростатичній плазмовій лінзі з динамічною хмарою просторового заряду, що дозволяє розраховувати процес накопичення просторового заряду в плазмовій лінзі та взаємодію створеної хмари просторового заряду з пучком заряджених часток, що проходить крізь апертуру лінзи з урахуванням процесу постійного надходження нових додатних іонів до хмари. Тестові розрахунки показують відповідність одержаних на основі моделі результатів з відомими з літератури, а також одержаними в експерименті. Чисельний експеримент підтвердив важливість врахування магнітного поля в об'ємі лінзи і критичність його величини для розділення електростатичного і магнітного фокусування та показав важливість дотримання правильного співвідношення між об'ємними зарядами лінзи і пучка, що фокусується. У випадку перевищення об'ємним зарядом пучка такого в лінзі фокусуєчий режим роботи плазмової лінзи порушується. Показано вплив на електронний пучок з малим струмом до 100 мА та середньою енергією 10–15 кеВ плазмової лінзи на основі електростатичної пастки для позитивних іонів.

ПРОЕКТ № Ф40.2/045

**НАУКОВО-ДОСЛІДНИЦЬКІ РОЗРОБКИ З МОДЕРНІЗАЦІЇ КАЛОРИМЕТРА
ДЕТЕКТОРА BELLE-2 ДЛЯ ВИВЧЕННЯ ФІЗИКИ В-МЕЗОНІВ**

Керівник проекту: *Гектін О.В.*

Метою НДР є аналіз факторів, визначальних для одержання кристалів CsI з високою радіаційною стійкістю для збереження стабільності характеристик детектора в умовах збільшення

радіаційного навантаження на калориметр. Об'єктами досліджень були нелеговані кристали CsI, отримані промисловим методом, та експериментальні зразки з добавками домішок, вирощені методами Бріджмена та Чохральського. Аналіз отриманих даних свідчить про істотну залежність абсорбційних, люмінесцентних та сцинтиляційних параметрів кристалів від домішкового катіонного та аніонного складу матеріалу. Пошук шляхів зниження вмісту небажаних кисневмісних домішок дозволили запропонувати використання іонів двовалентного європію як скавангера, що призводить до очищення розплаву CsI перед вирощуванням монокристала. Це, в свою чергу, дає можливість істотно поліпшити ІЧ-прозорість і позбутися від повільних сцинтиляційних імпульсів в кристалах, що дозволяє підвищити співвідношення Fast/Total, яке є критерієм придатності для застосування CsI як сцинтилятора. Вивчено вплив радіаційного опромінення на зміну світлового виходу власної люмінесценції CsI. Показано, що кристали CsI з низьким рівнем сторонніх катіонних та кисневмісних домішок не проявляють істотних змін оптичних характеристик під впливом іонізуючого опромінення. Визначено, що за допомогою вимірювання величини параметра Fast/Total у вихідних кристалах можна певною мірою прогнозувати рівень радіаційної стійкості кристалів CsI.

ПРОЕКТ № Ф40.3/017

СТВОРЕННЯ НАНОСТРУКТУРНИХ КАЛІКСАРЕНОВИХ РЕЦЕПТОРІВ ДЛЯ ВИСОКОСЕЛЕКТИВНОГО РОЗПІЗНАВАННЯ І ЗВ'ЯЗУВАННЯ ОРГАНІЧНИХ МОЛЕКУЛ В ГАЗОВІЙ ФАЗІ І РОЗЧИНАХ

Керівник проекту: *Кальченко О.І.*

Проведено теоретичне прогнозування стабільності адуктів аніон-каліксаренів у газовій фазі і розчинах. Синтезовані нові типи каліксаренів з поліфторфенільними замісниками на верхньому вінці макроциклу та досліджено їх структуру методом ядерного магнітного резонансу і рентгеноструктурним методом. Квантово-хімічними методами розраховано конформації фторфенільних похідних каліксаренів в газовій фазі, енергії їх взаємодії «*гість—господар*» з нуклеофільними молекулами та механізми стабілізації утворених адуктів. Синтезовано високо-ефективні синтони на основі тіакалікс[4]арену. Методом рентгеноструктурного аналізу досліджена молекулярна та кристалічна структура синтезованих сполук. Отримані результати можуть бути використані при створенні високочутливих датчиків для визначення аніонів. Отримані результати можуть бути корисними при створенні високочутливих датчиків, придатних для визначення амінокислот і похідних урацилу та аденіну в водних розчинах, а також для подальшого вивчення комплексоутворюючих властивостей (тіа)каліксаренів з біологічно важливими сполуками при їх зв'язуванні і розпізнаванні в біологічних середовищах та об'єктах фармакології і медицини.

Проведені дослідження дають можливість використання вищезгаданих типів водорозчинних (тіа)каліксаренів як модуляторів при протеолітичному розділенні.

ПРОЕКТ № Ф40.3/034

РОЗРОБКА НОВИХ ЕНАНТІСЕЛЕКТИВНИХ БІО- І ОРГАНКАТАЛІЗАТОРІВ НА ОСНОВІ РЕЧОВИН СИНТЕТИЧНОГО І ПРИРОДНОГО ПОХОДЖЕННЯ

Керівник проекту: *Колодяжний О.І.*

У результаті виконання проекту були вивчені методи ферментативного поділу і біокаталізу альфа- і бета-гідроксилвміщуючих сполук фосфору. Розроблені методи біокаталітичного поділу фосфонатів ліпазою *Burkholderia seracida*.

1. Розроблено метод ферментативного розділення рацемічних сполук на енантіомери за допомогою ацілювання вторинних спиртів внутрішніми циклічними ангідридами дікарбонових

кислот, що дозволяє уникнути хроматографічної очистки сполук. Метод може бути застосовано для розділення великих кількостей сполук у мультиграмовому діапазоні.

2. Розроблено метод синтезу всіх можливих стереоізомерів цис- і трансвіцінальних циклічних алкенів ($n = 4-6$) з абсолютною конфігурацією 1R,2R; 1S,2S, 1R,2S; 1S,2R, що є важливими хіральними синтонами для синтезу лейкотриєнів, простагландинів, а також використовуються у тотальному синтезі (+)-Естрону та (+)-Дезогестелу

3. Розроблені нові органокаталізатори на основі L-Тирозину і його похідних, здатних здійснювати каталіз альдольної реакції в гідроксилвміщуючих середовищах, включаючи водяні розчини.

4. Результати роботи мають науково практичне значення й будуть фундаментальною основою для майбутніх впроваджень у промисловість.

ПРОЕКТ № Ф40.3/041

НОВІ БІОМІМЕТИЧНІ КАТАЛІЗАТОРИ РОЗЩЕПЛЕННЯ МАКРОЕРГІЧНИХ РО І СN ЗВ'ЯЗКІВ НА ОСНОВІ МОДЕЛЬНИХ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК ПЕРЕХІДНИХ МЕТАЛІВ

Керівник проекту: *Фрицький І.О.*

Розробка нових, високоефективних методів розщеплення макроергічних фосфоестерних і потрійних СN зв'язків є актуальним завданням сучасної хімії. Новітні ефективні та високоселективні методи розщеплення згаданих зв'язків наразі затребувані в генній інженерії (гідроліз ДНК і РНК), хімічній екології (знешкодження фосфорорганічних (ФО) пестицидів та ФО отруйних речовин, похідних синильної кислоти), в органічному синтезі. У результаті здійснення проекту було розроблено нові синтетичні системи для ефективного розщеплення фосфоестерів, нітрилів та ізонітрилів, в яких поєднується кооперативна участь у каталізі металовмісних активних центрів і додаткових некоординованих функціональних груп, які можуть виступати як внутрішньомолекулярні нуклеофіли. Запропоновані каталізатори створені на основі моно- та біядерних комплексів з оригінальними хелатними та бінуклеативними лігандними системами, які містять окрім металозв'язуючих вузлів додаткові донорні групи (карбокисильні, оксимні, гідроксаматні, гидразидні). Цільові координаційні сполуки можуть розглядатися як моделі металовмісних активних центрів ензимів, які каталізують розщеплення широкого ряду фосфоестерів і сполук з потрійним зв'язком СN. У результаті здійснення проекту проведено пошук раціональних синтетичних шляхів для отримання цільових сполук, їх характеристику за допомогою сукупності різних аналітичних і фізико-хімічних методів, вивчення структурних і магнітних властивостей, а також дослідження кінетики каталітичного розщеплення ФО-пестицидів та інших фосфоестерних субстратів, нітрилів, ізонітрилів і ціанідів; встановлення кореляцій між структурними, спектральними, магнітними властивостями синтезованих комплексів та їх каталітичною активністю. Встановлено фактори, які впливають на каталітичну ефективність металокомплексу, що сприятиме раціональному дизайну функціональних моделей металоензимів і створенню нових біоміметичних каталізаторів.

ПРОЕКТ № Ф40.6/010

МЕТОДОЛОГІЯ ОБРОБКИ СЕЙСМІЧНИХ І ГРАВІМЕТРИЧНИХ ДАНИХ ПРИ ВИВЧЕННІ ЗЕМНОЇ КОРИ І ВЕРХНЬОЇ МАНТІ ДНІПРОВСЬКО-ДОНЕЦЬКОЇ ЗАПАДИНИ І СИБІРСЬКОЇ ПЛАТФОРМИ

Керівник проекту: *Єгорова Т.П.*

Головною задачею проекту був розвиток нових методів і технологій комплексної обробки та інтерпретації геофізичної інформації про структуру і динаміку земної кори та верхньої

мантії. Основу комплексу складають сейсмічні та гравіметричні методи, які було використано для обробки матеріалів глибинного сейсмічного зондування різних тектонічних структур території України та Росії: Дніпровсько-Донецької западини, кристалічних щитів Східно-Європейської платформи, а також Сибірської платформи. Нові технології (міграція заломлених та закритичних відбитих хвиль, побудова швидкісних розрізів та розрізів густини верхньої мантії з урахуванням сферичності Землі та з використанням унікальних записів мирних ядерних вибухів, математичне моделювання полів та ін.) дозволили детально дослідити структуру основних сейсмічних границь у земній корі, в верхній мантії та в зоні переходу від верхньої мантії до нижньої, побудувати комплексні тривимірні моделі верхньої мантії території Росії та отримати 2Д-моделі розподілу густини у верхній мантії та перехідній зоні за трьома профілями (Кварц, Кратон і Кімберліт).

Ці нові дані дозволяють більш обґрунтовано дослідити динаміку верхніх оболонок Землі та зрозуміти історію формування різних типів геологічних структур.

ПРОЕКТ № Ф40.7/041

**КРИСТАЛОХІМІЯ, КРИСТАЛОГЕНЕЗИС І БІОІМІТЕТИЧНИЙ СИНТЕЗ
ОРГАНО-ФОСФАТНИХ НАНОКОМПЗИТИВ, ЩО УТВОРЮЮТЬСЯ В ЖИВИХ ОРГАНІЗМАХ**

Керівник проекту: *Дубок В.А.*

Сформовано колекцію зразків фосфатних біомінералів біогенного походження та їх синтетичних аналогів. Зразки було відпалено в діапазоні температур 500–1100 °С. Досліджено загальні властивості та кристалохімію біомінералів як мінерально-органічних наноасоційованих систем. Подібність структур синтетичного та біогенного апатиту доведена за допомогою методів РФА та ІЧС. Показано, що в інтервалі $T = 600\text{--}800$ °С біогенний апатит представляє собою в основному гідроксилкарбонат апатит, за більш високих температур — гідроксилапатит, синтетичний матеріал — гідроксилапатит з домішкою трикальційфосфату. Показано, що при термообробці в умовах нестачі кисню, в біогенному гідроксилапатиті формуються азотовмісні радикали, що входять в структуру біогенного гідроксилапатиту за рахунок ізоморфного заміщення фосфору в структурі гідроксилапатиту азотом. Виявлено, що термообробка в умовах надлишку кисню не призводить до утворення таких радикалів. Одержано нові дані щодо умов формування азотвмісного центру в біогенному гідроксилапатиті. Проведено комп'ютерне моделювання катіонних та аніонних ізоморфних заміщень у структурі гідроксилапатиту. Дані комп'ютерного моделювання підтверджують отримані експериментальні дані. Проведена робота по синтезу і дослідженню характеристик біогенного і синтетичного ГАП показала, що отриманий синтетичний матеріал за своїми властивостями досить близький до біоapatиту і може використовуватися як біосумісний імплантат.

Результати НДР можуть бути використані в матеріалознавстві, нанотехнології, медицині, наномінералогії та нанofізичі.

ПРОЕКТ № 41.1/001

**КОЛИВАННЯ МЕТАЛОПОЛІМЕРНИХ ТА КОМПЗИТНИХ ОБОЛОНОК
ПРИ ВЗАЄМОДІЇ З ПРУЖНИМ ТА РІДИННИМ НАПОВНЮВАЧЕМ**

Керівник проекту: *Кубенко В.Д.*

Складні процеси втрати стійкості оболонкових елементів із КМ з урахуванням конструктивних особливостей, що зустрічаються на практиці, дотепер практично не були досліджені.

Виконання проекту передбачало розробку та реалізацію відповідного математичного апарату, який дозволить, з одного боку, побудувати нові адекватні розрахункові моделі системи *пружний об'єкт—рідина*, з другого — дослідити вплив конструктивних особливостей та зовнішніх силових факторів на значення величин критичних швидкостей руху рідини та на характерні особливості дивергентної та динамічної втрати стійкості даного об'єкту.

У результаті розробки отримано принципово нові результати, важливі для прогнозування динамічної поведінки оболонкових конструкцій із металополімерних та композитних матеріалів при взаємодії з пружним та рідинним (усталений та нестационарний потоки) середовищами.

Результати досліджень можуть бути використані при вирішенні питання економії енергоресурсів при транспортуванні рідин шляхом вибору оптимальних режимів перекачування в зонах динамічної нестійкості трубопроводів та в резонансних зонах і є важливими для прогнозування експлуатаційної надійності різноманітних транспортуючих рідин трубопровідних систем з метою запобігання аварійних ситуацій, які можуть призвести до суттєвого екологічного забруднення навколишнього середовища.

ПРОЕКТ № 41.1/006

СИНТЕЗ І ВЛАСТИВОСТІ БІОНАНОМАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ АПАТИТОПОДІБНИХ СИСТЕМ, МОДИФІКОВАНИХ НАНОЧАСТИНКАМИ МЕТАЛІВ, ФУЛЕРЕНАМИ ТА ВУГЛЕЦЕВИМИ НАНОТРУБКАМИ

Керівник проекту: *Карбівський В.Л.*

Вперше синтезована серія композитів Са-ГАП-вуглецеві наноматеріали та всебічно досліджено їх фізико-хімічні властивості та атомну будову. Встановлено, що для більш оптимальної взаємодії апатиту з вуглецевими нанотрубками при утворенні композиту необхідна попередня функціоналізація нанотрубок. Введення вуглецевих наноматеріалів в гідроксилapatит кальцію призводить до утворення молекулярних комплексів і впорядкування структури. Вперше визначено ефекти в еволюції структури валентних смуг та зарядових станів атомів залежно від типу та ступеня ізоморфного ізовалентного заміщення в катіонній підґратці стехіометричної матриці апатиту. Кореляція положень та форми ліній розрахункових та експериментальних даних свідчить про переважне місцезнаходження 3d-металів у Са(2) позиції структури апатиту.

Таким чином, отримані в результаті виконання проекту результати надають науково обґрунтовані передумови для створення біонаноматеріалів нового покоління, а саме біоімплантатів, біосенсорів та лікарських препаратів адаптаційної та пролонгованої дії.

ПРОЕКТ № 41.1/009

ТЕХНОЛОГІЯ, СПЕКТРАЛЬНІ ТА ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ БАГАТОШАРОВИХ НИЗЬКОРОЗМІРНИХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВІ ХАЛЬКОГЕНІДІВ СВИНЦЮ

Керівник проекту: *Фреїк Д.М.*

При виконанні проекту досліджені фундаментальні закономірності формування напівпровідникових низькорозмірних структур халькогенідів свинцю парофазними методами, встановлені технологічні режими, що забезпечують оптимальні значення термоелектричних параметрів: питома електропровідність; коефіцієнт Зеебека, термоелектрична потужність; коефіцієнт теплопровідності; термоелектрична добротність. Досліджено процеси структуроутворення гетеросистем на основі халькогенідів свинцю із заданими топологічними характеристиками. Розроблені у ході виконання проекту методи отримання наноструктур захищено патентами України.

Результати роботи можуть бути використані у вузах при читанні відповідних спецкурсів, що призведе до проведення спільних семінарів, написання спільних публікацій з науковцями

інших організацій у продовженні теми проекту. Також робота може зацікавити виробників мікро- та наноелектроніки з метою впровадження отриманих результатів у виробництво.

ПРОЕКТ № 41.1/015**ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ТВЕРДИХ РОЗЧИНІВ НА ОСНОВІ BiFeO_3 ПОБЛИЗУ МОРФОТРОПНОЇ ФАЗОВОЇ МЕЖІ**

Керівник проекту: *Єременко В.В.*

Мета проекту — отримання нових магнітоелектричних матеріалів і п'єзоелектричних матеріалів, що не містять свинцю. Очікувані результати знайдуть застосування при розробці сегнетомагнітних і п'єзоелектричних матеріалів для пристроїв мікроелектроніки, датчиків, чутливих до магнітного і електричного полів і деформації.

Розроблено оптимальні режими одержання сегнетокераміки на основі фериту вісмуту з малими діелектричними втратами, придатної для досліджень у великих електричних полях, і визначено магнітні та кристалічні структури отриманих твердих розчинів з використанням методів дифракції нейтронів, електронів і синхротронного рентгенівського випромінювання. Розроблена методика введення мікродобавок для зменшення діелектричних втрат внаслідок наявності в зразках різновалентних іонів заліза. Проведено дослідження магнітних, оптичних та діелектричних властивостей, магнітоелектричного ефекту в широкому діапазоні концентрацій лужноземельних іонів. Магнітні та магнетотранспортні властивості досліджено в температурному інтервалі 1,5—700 К у магнітних полях до 14 Т.

ПРОЕКТ № 41.1/019**РОЗРОБКА ФІЗИКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ОСНОВ ФОРМУВАННЯ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОМІКРОСТРУКТУРНИХ ЗАХИСНИХ ПОКРИТТІВ НА ОСНОВІ Ti-Hf-Si-N ; Zr-Ti-Si-N З ВИСОКОЮ ТВЕРДІСТЮ ≥ 40 ГПА, ТЕРМІЧНОЮ СТАБІЛЬНІСТЮ ≥ 1000 ОС ТА ВИСОКИМИ ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИМИ ВЛАСТИВОСТЯМИ**

Керівник проекту: *Погребняк О.Д.*

Створення багатофункціональних, нанокомпозитних або нанокристалічних матеріалів — багатокомпонентних по складу і впорядкованих по структурі — дуже важлива задача для сучасного матеріалознавства. Ці нові покриття повинні мати високі експлуатаційні властивості, які цілеспрямовано можуть змінюватися шляхом зміни параметрів їх складу і структури.

За допомогою сучасних методів отримання структурованих нанопокриттів залежно від способу здобуття (прямоточним іонно-плазмовим потоком або сепарованим) розмір кристалітів у покритті Ti-Hf-Si-N змінюється від 10 до 4,5 нм, а у покриттів на основі Zr-Ti-Si-N — в межах 15—20 нм, що дає можливість отримання нових надтвердих покриттів з високими фізико-механічними властивостями, такими як: твердість, покриття на основі Ti-Hf-Si-N отримані за допомогою прямоточного потоку, $H = (48,4 \pm 1,4)$ ГПа; модуль пружності — $E = (520 \pm 12)$ ГПа.

Можливе використання отриманих наноструктурних покриттів для захисту робочого інструменту і лопаток турбін на заводах «Турбомеханічний завод» в м. Полтава та «Авіакон» в м. Конотоп для вертольотів і Мі-6.

ПРОЕКТ № 41.1/025**НАДШВИДКІ ЕЛЕКТРОННІ ПРОЦЕСИ І НЕЛІНІЙНО-ОПТИЧНІ ЯВИЩА У ФОТОПОЛІМЕРНИХ КОМПЗИТАХ З НАНОЧАСТИНКАМИ МЕТАЛІВ І ПЕРІОДИЧНИХ СТРУКТУРАХ НА ЇХ ОСНОВІ**

Керівник проекту: *Смірнова Т.М.*

Полімерні нанокомпозити з наночастинками благородних металів дозволяють створювати нові матеріали для фотоніки і оптоелектроніки. Голографічне впорядкування подібних нано-

композитів дозволяє створювати фотонно-кристалічні структури різної розмірності (1D, 2D, 3D), що поєднують дифракційні властивості з особливими властивостями наночастинок. Результати дослідження створюють підґрунтя для подальшої розробки керованих світлом дифракційних елементів і нового покоління лазерів.

Зараз у світі проводяться розробки лазерів з фотонно-кристалічними резонаторами, що використовують плазмонні структури для покращення енергетичних характеристик лазерів, а саме зменшення порогу генерації і збільшення ККД лазерів. Крім того, збудження плазмонного резонансу призводить до збільшення нелінійного відгуку середовища, зростання інтенсивності люмінесценції та вимушеного комбінаційного розсіяння.

Тому одержання нових результатів про нелінійно-оптичні властивості нанокompозитів та 1D-, 2D-структур з наночастинами металів та дослідження властивостей лазерів з керуючими структурами на їх основі створює підґрунтя для подальшої розробки керованих світлом дифракційних елементів і нового покоління лазерів.

ПРОЕКТ № 41.1/031

ДОСЛІДЖЕННЯ СТІЙКОСТІ ТА РОЗРОБКА МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗАННЯ БАГАТОКРИТЕРІАЛЬНИХ ЗАДАЧ ДИСКРЕТНОЇ ОПТИМІЗАЦІЇ

Керівник проекту: *Сергієнко І.В.*

Результати досліджень, проведених за даним проектом, можуть бути використані як основа при прийнятті рішень в умовах невизначеності, зокрема будуть застосовані в теоретико-економічних дослідженнях при математичному моделюванні перехідних процесів у економіці України та визначенні нових закономірностей функціонування як економіки в цілому, так і її окремих складових, а також у ході прийняття управлінських рішень на різних рівнях господарювання. За умов перехідної економіки України, якій властиві невідповідність раніше створених виробничих технологій новим умовам господарювання, відсутність апробованих механізмів ринкової саморегуляції, які в країнах з ринковою економікою формувалися протягом десятиліть, розроблені нові математичні методи ідентифікації, регуляризації та розв'язання некоректних векторних моделей дискретної оптимізації будуть важливим інструментарієм для підтримки прийняття рішень у різних сферах людської діяльності і всіх учасників цих процесів — від органів державної влади та управління до підприємницьких структур та споживачів. Така підтримка включає отримання повної та достовірної інформації шляхом надання можливості її аналізу, впорядкування та корекції, а також формування певних рекомендацій щодо раціональних управлінських рішень.

ПРОЕКТ № 41.1/044

ТОПОЛОГІЧНА САМООРГАНІЗАЦІЯ КОВАЛЕНТНИХ СІТКОВИХ СТРУКТУР ЯК ОСНОВА ДЛЯ РОЗРОБКИ ВИСОКОНАДІЙНИХ СЕРЕДОВИЩ ІЧ-ФОТОНІКИ

Керівник проекту: *Ваків М.М.*

Даний проект був спрямований на розробку методології відбору високонадійних склоформуєчих сплавів на основі халькогенідів германію для застосування в сучасній ІЧ-телекомунікаційній техніці, оптоелектроніці, фотоніці.

Конкретна фундаментальна задача, вирішена в проекті, полягає у дослідженні експериментальними та квантово-механічними методами процесів топологічної самоорганізації структури халькогенідних стеклов при зміні їх хімічного складу.

Отримані результати мають важливе значення для сучасних ІЧ-фотоніки, телекомунікаційних технологій та оптоелектронного матеріалознавства. Практична цінність даної НДР полягає у

апробації нового підходу для визначення найбільш оптимальних і високонадійних складів халькогенідних стекел для прикладного застосування. Це дозволить прогнозувати межі самоорганізованої фази в халькогенідних стеклах більш складних складів. За технічними характеристиками одержані зразки халькогенідних стекел будуть переважати відомі світові аналоги підвищеною стійкістю до процесів фізичного старіння та надійністю в експлуатації в умовах зовнішнього впливу.

ПРОЕКТ № 41.2/014

ДОСЛІДЖЕННЯ ЗАКОНОМІРНОСТЕЙ ФОРМУВАННЯ СТРУКТУРИ І ВЛАСТИВОСТЕЙ ЗОНИ ЛАЗЕРНОГО ВПЛИВУ ПРИ ГІБРИДНИХ ПРОЦЕСАХ ЛАЗЕРНОГО ЗВАРЮВАННЯ І НАПЛАВЛЕННЯ

Керівник проекту: *Шелягін В.Д.*

Проект присвячений вирішенню проблеми дослідження закономірностей формування структури і властивостей у зоні лазерної дії при гібридних процесах лазерного зварювання і наплавлення. Очікується, що заплановані дослідження дозволять встановити закономірності формування структури і властивостей матеріалів у зоні впливу при гібридних процесах наплавлення і зварювання з використанням лазерного випромінювання.

Розробка апаратури і засобів, що забезпечують контроль, управління і взаємне коригування складових процесів гібридного зварювання та направлення, дозволить вести свідоме управління поєднанням параметрів двох джерел енергії, що в результаті забезпечить задане формування зварного шва чи зони наплавлення за новими технологічними схемами з прогнозованою ванною розплаву і якістю наплавленого шару, що виключає утворення тріщин і яке гарантуватиме високі механічні характеристики.

Розроблені на базі одержаних результатів технології стануть комерційним продуктом і зможуть бути комерціалізовані у вигляді виконання окремих замовлень або у вигляді організації дільниць під ключ при комплектуванні обладнанням необхідного рівня в залежності від вимог замовника. При комерційній реалізації результатів виконання проекту передбачається рівне право сторін на результати робіт.

ПРОЕКТ № 41.2/017

НАУКОВІ ТА ТЕХНОЛОГІЧНІ ОСНОВИ ЗМІЦНЕННЯ Й ВІДНОВЛЕННЯ МЕТАЛЕВИХ ПОВЕРХОНЬ МЕТОДОМ ЕЛЕКТРОІСКРОВОГО ЛЕГУВАННЯ З ДОДАТКОВИМ УЛЬТРАЗВУКОВИМ ВПЛИВОМ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ БАГАТОФУНКЦІОНАЛЬНИХ ЕЛЕКТРОДНИХ СИСТЕМ, ЛЕГОВАНИХ ЗАЛІЗОМ, КОБАЛЬТОМ І НІКЕЛЕМ

Керівник проекту: *Паустовський О.В.*

Проект спрямований на розробку основних принципів створення за новітніми технологіями багатокомпонентних електродів на основі інтерметалідів та електроіскрових покриттів з них з високими експлуатаційними характеристиками.

Проведені дослідження в рамках проекту дали можливість встановити основні закономірності створення електродних композиційних матеріалів, що містять інтерметалідні сполуки, в першу чергу формування їх фазового складу та структурного стану.

Запровадження розроблених у цьому проекті технологій створення електродних матеріалів та їх нанесення з метою зміцнення та відновлення зношених деталей дасть можливість зменшити витрати на ремонт устаткування в 5–6 разів, підвищити зносостійкість у 2–4 рази, жаростійкість у 5–6 разів, завдяки чому буде досягнута значна економія матеріальних та енергетичних ресурсів у машинобудівній галузі виробництва.

Результати роботи можуть бути використані на підприємствах машинобудівного, металургійного та гірничорудного комплексу для досягнення максимальної зносостійкості оброблених виробів та електроерозійного відновлення зношених деталей технологічного обладнання.

ПРОЕКТ № 41.2/018
РОЗРОБКА НАУКОВИХ ОСНОВ ТЕХНОЛОГІЇ ТЕМПЛЕТНИХ НАНОСТРУКТУР ІНТЕГРАЛЬНИХ
ОПТОЕЛЕКТРОННИХ ЕЛЕМЕНТІВ НА ІІІ-НІТРИДАХ

Керівник проекту: *Осінський В.І.*

Розроблені нові нанoelementи та технологія нанoelectronіки для отримання випромінювачів світла у видимому та ближньому ультрафіолетовому діапазоні, які можна інтегрувати з сучасною мікроеlectronною елементною базою.

Розроблена технологія отримання впорядкованих масивів напівпровідникових наноструктур ІІІ-нітридів на пластинах кремнію великих діаметрів. Експериментально одержані нанощари AlN , AlN_xO_{1-x} та Al_2O_3 і вперше показана можливість заміщення атомів кисню атомами азоту при порівняно низькій температурі енергії іонів. Наноструктури одержані в плазмі азоту з енергією 1–150 еВ протягом 5–10 хв при температурі 150–200 °С. Формування структур AlN/AlN_xO_{1-x} проводиться всередині нанопір оксиду алюмінію.

Показано експериментально, що при опроміненні низькоенергетичними іонами N+2 має місце дисоціація молекул оксиду алюмінію, що на 2–3 порядки прискорює хімічні реакції в порівнянні з термічною активацією. При цьому розширюється взаємна розчинність Al_2O_3 з AlN , що сприяє утворенню квантово-розмірних структур, зокрема квантових точок. Ця технологія може бути використана для створення елементів квантового комп'ютера.

ПРОЕКТ № 41.3/005
ДИЗАЙН ЧУТЛИВИХ ДО ВИДИМОГО СВІТЛА
ФОТОВОЛЬТАЇЧНИХ КОМІРОК НА ОСНОВІ КВАНТОВИХ ТОЧОК
ХАЛЬКОГЕНІДІВ МЕТАЛІВ, ШИРОКОЗОННИХ ОКСИДНИХ НАПІВПРОВІДНИКІВ
ТА ПОХІДНИХ ГРАФЕНУ

Керівник проекту: *Кучмій С.Я.*

В результаті виконання проекту розроблені:

а) нові методи синтезу квантово-розмірних халькогенідних напівпровідників та частково відновленого графен-оксиду з використанням хімічних, фотохімічних, фотокаталітичних та фотоелектрокаталітичних підходів та процесів послідовної адсорбції іонів;

б) нові методи формування, а також методи електрохімічного контролю та характеристики складно-композиційних плівкових структур на основі мезопористих оксидів титану та цинку, квантово-розмірних частинок халькогенідів кадмію, цинку, свинцю та частково відновленого графен-оксиду;

в) плівкові, чутливі до видимого світла фотоелектроди, перспективні для використання у сонячних комірках третього покоління.

Досліджено динаміку переносу заряду в системі електроліт/наночастинка/метал, досліджено електрокаталітичну активність таких систем в редокс-процесах.

Встановлені основні фактори, що визначають ефективність просторового розділення та транспорту фотогенерованих зарядів в наноструктурах за участю похідних графену.

Визначені оптимальні режими функціонування модельних фотовольтаїчних комірок на основі плівок, що складаються з мезопористих оксидів титану та цинку, наночастинок халькогенідів та частково відновленого графен-оксиду.

ПРОЕКТ № 41.3/008

**ПРОДУКТИ АРИЛЮВАННЯ ФУНКЦІОНАЛІЗОВАНИХ ПОХІДНИХ ФУРАНУ,
ТІОФЕНУ І ПІРОЛУ В МОЛЕКУЛЯРНОМУ ДИЗАЙНІ АЗОТОВІСНИХ ГЕТЕРОЦИКЛІВ**

Керівник проекту: *Обушак М.Д.*

Основна ідея проекту: конструювання складних гетероциклів, в тому числі нових гетероциклічних систем, шляхом використання функціональних похідних арилфурану, арилпіролу і арилтіофену. Висока реакційна здатність таких сполук дозволила здійснити синтез складних багатоядерних гетероциклічних похідних з високим потенціалом біологічної активності. При цьому перелічені реагенти в залежності від характеру функціоналізації виступали в циклізаціях як амінними, так і карбонільними (альдегідними) компонентами. Варіювання інших компонентів циклізацій відкрило підходи до синтезу похідних різноманітних гетероциклічних систем, в тому числі багатоядерних з різними гетероатомами.

Варто відзначити, що арилювання похідних піролу арендіазонієвими солями в літературі було неописане і були лише нечисленні приклади застосування у цій реакції похідних тіофену, де цільові продукти одержували з невисокими виходами. Ускладнення, які виникали, були пов'язані з високою ацидофобністю пірольного кільця. Опираючись на свій досвід у цій області, автори проекту припустили можливість успішного здійснення даних реакцій, розвинули цю гіпотезу і успішно її реалізували.

Були синтезовані сполуки з новими ансамблями гетероциклів, перспективні для скринінгу на біологічну активність, вивчені регіонаправленість і селективність циклізацій. Розроблено ефективні методи синтезу нових реагентів для гетероциклізацій, що ґрунтуються на використанні різних варіантів арилювання похідних піролу, фурану і тіофену. Одержані функціоналізовані 5-арилпіроли (тіофени, фурани) випробувані як структурні блоки в молекулярному дизайні азотовмісних гетероциклічних сполук (тіазолу, тіадіазину, оксазину, триазолу, триазоло[3,4-*b*]-1,3,4-тіадіазолу).

ПРОЕКТ № 41.3/013

**ФОСФОНАТИ ПАЛАДІЮ(II) В НОВИХ ТЕХНОЛОГІЯХ ДІАГНОСТИКИ
ТА ЛІКУВАННЯ РЯДУ ОНКОЛОГІЧНИХ ЗАХВОРЮВАНЬ**

Керівник проекту: *Пехньо В.І.*

У результаті виконання проекту було:

визначено координаційні особливості похідних фосфонових кислот на підставі даних про будову, склад, стійкість та спектральні характеристики комплексів;

розроблено концентраційні умови для створення стійких у часі та стабільних за складом розчинів комплексів паладію(II) з 1-гідроксиетиліден-1,1-дифосфоновією кислотою;

підбрано концентраційні умови для синтезу комплексів паладію(II) з похідними фосфонових кислот, виходячи з діаграм розподілу рівноважних концентрацій комплексів;

проведено відбір найбільш перспективних для створення нових протипухлинних препаратів комплексів за даними скринінгу їх біологічної активності.

Отже, в результаті виконання проекту отримано та досліджено нові перспективні для медицини комплекси паладію з похідними фосфонових кислот, встановлено їх дію на здорові та вражені онкологічними захворюваннями тканини.

ПРОЕКТ № 41.4/023

ВИВЧЕННЯ ВЗАЄМОЗВ'ЯЗКУ МІЖ УТВОРЕННЯМ ОКИСЛЕНИХ ПОХІДНИХ ТІАМІНУ І ПОРУШЕННЯМ МЕТАБОЛІЗМУ В НЕСПРИЯТЛИВИХ УМОВАХ З МЕТОЮ РОЗРОБКИ СПОСОБІВ КОРЕКЦІЇ

Керівник проекту: *Донченко Г.В.*

Досліджено механізм впливу активних форм азоту і водню на окислення тіаміну і його похідних. Визначено вихід флуоресціюючих метаболітів тіаміну і тіаміндисульфідів після впливу іонізуючого випромінювання, ультразвуку (880 КГц, інтенсивність – 0,2–2 Вт/см²) на водні розчини тіаміну та на донорську кров. Досліджена можлива роль ксенобіотиків (на прикладі парацетамолу) в окисненні похідних тіаміну в тканинах та можливість захисту протейнів крові від нітрування тирозильних залишків у несприятливих умовах шляхом введення терапевтичних доз тіаміну.

Отримані дані обґрунтовують використання тіаміну і його гідрофобних метаболітів (тіохром і оксодигідротіохром), а також їх комплексів з іншими біологічно активними сполуками як антиоксидантів для інгібування реакцій нітрації тирозинильних залишків білків, що протікають при дії рентгенівського або γ -випромінювання при запальних процесах. Розроблено тест на метаболічні порушення, викликані дією на організм діоксиду азоту і пероксинітриду, утворених під дією іонізуючого опромінення та інших несприятливих факторів зовнішнього середовища, які супроводжуються окислювальним і нітрозильним стресом.

На основі отриманих результатів буде розроблено новий колориметричний метод визначення тіаміну та ТДФ у фармацевтичних препаратах. Отримані результати також є базою для розробки діагностичного тесту на визначення отриманої людиною дози опромінення і взагалі на факт наявності такої дії.

ПРОЕКТ № 41.4/028

РОЗРОБКА ПРИНЦИПІВ І МЕТОДІВ ОЦІНКИ ВПЛИВУ ЕКСПЛУАТАЦІЇ АЕС НА ГІДРОЕКОСИСТЕМИ

Керівник проекту: *Протасов О.О.*

Головна наукова фундаментальна ідея, яку було закладено в основу проекту, полягає в тому, що в біосфері поряд з природними екосистемами все значнішу роль відіграють антропогенні техно-екосистеми, структура і функціонування яких достатньо не вивчені. У значній мірі це стосується техно-екосистем АЕС. На вивчення структури та функціонування техно-екосистем АЕС були спрямовані дослідження. Система оцінок впливу АЕС на довкілля може бути розроблена тільки на основі досконалого вивчення структури та функціонування цілісної техно-екосистеми.

У процесі виконання проекту вперше було запропоновано комплексну оцінку впливу АЕС на довкілля на основі концепції техно-екосистеми. Була розроблена критеріальна база для експертних оцінок, розроблена методологія оцінки на основі принципів Водної рамкової директиви ЄЕС та використана національна методика оцінки якості водного середовища. Розроблено концепцію техно-екосистеми АЕС, яка використовується в Регламенті гідробіологічного моніторингу.

У процесі виконання проекту було розроблено фундаментальні основи гідробіологічного моніторингу водойм-охолоджувачів, систем охолодження та системи технічного водопостачання атомних електростанцій. Ці розробки було використано у документі «Регламент гідробіологічного моніторингу водойми-охолоджувача, систем охолодження та системи технічного водопостачання ВП Хмельницької АЕС» № О.ЛО.6211.РГ-12. Аналогічні регламенти на основі вказаних фунда-

ментальних розробок можуть бути підготовані для всіх АЕС та ТЕС України. Основні положення регламенту можна також запропонувати для використання на білоруських енергетичних об'єктах.

ПРОЕКТ № 41.4/042

**РОЛЬ ГЕНІВ І ФЕРМЕНТІВ ФОСФОЛІПІДНОГО ТА ВУГЛЕВОДНОГО МЕТАБОЛІЗМУ
В ПРОЦЕСАХ РОСТУ І ТРОПІЗМІВ У РОСЛИН**

Керівник проекту: Колесников Я.С.

У результаті проведеного аналізу були охарактеризовані експресія гена і ферментативна активність бета-глюкозидази в різноманітних органах рослини (і різних зонах органу) в ході розвитку молодих рослин. Досліджено вплив різноманітних світлових умов вирощування молодих рослин на експресію гена та активність ферменту бета-глюкозидази, вивчені особливості функціонування бета-глюкозидази (на рівні активності ферменту та експресії гена) в процесах первинного росту рослини (листка) в ході онтогенезу за різних умов освітленості рослин. Оцінена участь бета-глюкозидази в контролі метаболізму ростових фітогормонів рослини і оцінена її роль у тропічних реакціях.

Аналіз отриманих результатів свідчить, що процеси тропізмів рослин у відповідь на зміну напрямку вектора гравітації проходять за участі фосфоліпази D. Локальне підвищення рівня гормону ауксину в рослинних тканинах інтенсифікує процеси гравітропізму, блокувані додаванням інгібітора фосфоліпази D 1-бутанолу.

Результати досліджень можуть бути використані для розробки методик вирощування рослин в умовах мікрогравітації та тривалих космічних польотів.

ПРОЕКТ № 41.4/043

РОЛЬ ГЕНА PTTG У РОЗВИТКУ ПЕРЕДРАКОВИХ ПАТОЛОГІЙ ПЕЧІНКИ

Керівник проекту: Сибірна Н.О.

Хронічні захворювання печінки (ХЗП) становлять серйозну проблему в сучасній медицині, оскільки довгостроково протікають безсимптомно і за відсутності лікування призводять до розвитку цирозу печінки (ЦП). Останнім часом все частіше з'являються експериментальні роботи, присвячені ефективності генної терапії фіброзу і цирозу печінки. Роль багатьох сигнальних каскадів у патогенезі фіброзу печінки залишається нез'ясованою. Серед сигнальних факторів особливу увагу заслуговує недавно відкритий трансформуючий ген пухлин гіпофіза (Pituitary tumour transforming gene; pttg – PTTG), залучений у широкий спектр фізіологічних і онкогенних функцій, зокрема в регуляцію клітинного циклу, репарації ДНК, ангиогенез і онкогенез. Експресія PTTG корелює з інвазивністю і стадією пухлинного процесу, що дозволяє використовувати аналіз кількості білка PTTG як прогностичного маркерного показника.

У зв'язку з цим було вивчено вплив гена PTTG на фіброгенез та органогенез печінки на прикладі експериментальної моделі фіброзу печінки у мишей для подальшого використання як одного із методів генної терапії. У результаті проведених досліджень отримані результати, що становлять наукову базу для розробки методів коригування функціонального стану гепатоцитів при лікуванні хворих із передраковими станами та онкопатологіями печінки за допомогою корекції експресії гена PTTG.

Отримані результати можна використати для подальших досліджень, а саме для пошуку способу інгібування експресії гена PTTG у експериментальних моделях.

*Докладну інформацію можна отримати в Державному Фонді фундаментальних досліджень
м. Київ, бульвар Шевченка, 16, кім. 404; телефони: (044)246-39-27, 246-39-29, 246-39-30
веб-сторінка: www.dffd.gov.ua*