**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**

стипендіата Кабінету Міністрів України для молодих вчених

за період з травня 2024 року по жовтень 2024 року

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Житняківської Ольги Анатоліївни

(прізвище, ім'я )

Дата народження: 16.09.1989

Науковий ступінь, вчене звання: кандидат фізико-математичних наук, доцент

Номер та дата постанови Комітету з Державних премій України в галузі науки і техніки, якою призначено стипендію Кабінету Міністрів України для молодих вчених:

08 травня 2024 р. №2\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Повне найменування організації, де працює (навчається) стипендіат: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**1. ОДЕРЖАНІ НАУКОВІ ТА НАУКОВО-ПРИКЛАДНІ РЕЗУЛЬТАТИ**(до 100 рядків тексту. Сформулювати результати списком у вигляді висновків до дисертації)

За звітний період були отримані наступні результати:

1. Метод молекулярного докінгу було використано для вивчення взаємодій між солями важких металів (AsO₄, Cd(NO₃)₂, Fe(NO₃)₃, NiSO₄, PbSO₄, PtCl₄), вуглецевими наноматеріалами (фулерени C₂₄ і C₆₀, а також одностінні вуглецеві нанотрубки) і β-лактоглобуліном. Результати докінгу показали, що: 1) розмір, форма та поверхневі властивості вуглецевих матеріалів суттєво впливають на здатність комплексів β-лактоглобуліну з вуглецевими наноматеріалами взаємодіяти з різними важкими металами; 2) афінність солей важких металів до створених наносистем в значній мірі варіюється; 3) водневі зв’язки та гідрофобні взаємодії відіграють суттєву роль у комплексоутворенні солей важких металів з β-лактоглобуліном та вуглецевими матеріалами.
2. З використанням методу молекулярного докінгу було визначено та охарактеризовано центри зв’язування важких металів (Cu2+, Fe3+, Mg2+, Mn2+, Zn2+, Cd2+, Fe2+, Ni2+, Hg2+, Co2+, Cu+, Au+, Ba2+, Pb2+, Pt2+, Sm3+, і Sr2+) з білками (β-лактоглобулін, 7S глобулін і гліцинін з соєвих бобів) для оцінки впливу структури білка на їхню метал-зв'язувальну здатність та селективність. Отримані результати молекулярного докінгу вказують на взаємодію життєво важливих та токсичних важких металів з різними зв'язувальними сайтами білків, ймовірно, через електростатичні взаємодії та хелацію металів з амінокислотними залишками цистеїну, аспарагінової кислоти, глутамінової кислоти та гістидину. Порівняння залишків з якими взаємодії метал між різними білками, свідчить про роль різних амінокислотних залишків, підкреслюючи важливість як властивостей металу, так і білка для стабілізації білок-металевого комплексоутворення.

**2. ОСНОВНІ НАУКОВІ (НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ) ПОКАЗНИКИ РЕЗУЛЬТАТІВ**

(зараховуються виключно ті, що отримані за звітний період)

2.1. Статті у журналах, що входять до наукометричних баз даних WebofScience та/або Scopus

Таблиця 1

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| №  з/п | Повні дані статей  (підкреслити прізвище стипендіата у списку авторів) | Наукометрична база даних |
| 1 | Zhytniakivska, O., Tarabara, U., Vus, K., Trusova, V., & Gorbenko, G. (2024). Molecular Docking Study Of Protein-Functionalized Carbon Nanomaterials For Heavy Metal Detection And Removal. East European Journal of Physics, (3), 484-490. https://doi.org/10.26565/2312-4334-2024-3-59 | Scopus |
| 2 | Zhytniakivska, O., Tarabara, U., Vus, K., Trusova, V., & Gorbenko, G. (2024). Deciphering the Molecular Details of Interactions Between Heavy Metals and Proteins: Molecular Docking Study. East European Journal of Physics, (2), 470-475. https://doi.org/10.26565/2312-4334-2024-2-62 | Scopus |

2.2. Статті у журналах, включених до категорії «Б», що входять до переліку фахових видань України, статті у закордонних журналах, що не увійшли до підпункту 2.1 цього пункту, а також тези доповідей англійською мовою на міжнародних конференціях

Таблиця 2

|  |  |
| --- | --- |
| №  з/п | Повні дані статей і тез доповідей  (підкреслити прізвище стипендіата у списку авторів) |
| 1 | Дані відсутні |

2.3. Монографії та/або розділи монографій, що опубліковані українськими видавництвами за звітний період

Таблиця 3

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № з/п | Повні дані монографій (розділів)  (підкреслити прізвища авторів у списку виконавців) | Кількість друкованих  аркушів |
|  | Дані відсутні |  |

2.4. Монографії та/або розділи монографій, що опубліковані за звітний період у закордонних виданнях мовами країн, які входять до Організації економічного співробітництва та розвитку, та/або офіційними мовами Європейського Союзу

Таблиця 4

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| № з/п | Повні дані монографій (розділів)  (підкреслити прізвище стипендіата у списку авторів) | Кількість друкованих  аркушів |
|  | Дані відсутні |  |

2.5 Господарчі договори/контракти, державні та/або міжнародні гранти, участь у виконанні яких брав стипендіат з оплатою праці

Таблиця 5

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| № з/п | Назва (номер реєстрації) | Замовник | Загальний обсяг фінансування проєкту, млн. гривень |
| 1 | Розробка економічно-доступних наносистем для швидкої ідентифікації та очищення води від іонів важких металів на основі наноалотропів вуглецю та амілоїдів з органічних відходів. | Міністерство освіти і науки України | 1,000000 |

2.6. Отримані патенти України/інших країн на винахід та інші охоронні документи на об’єкти права інтелектуальної власності (ОПІВ) щодо яких стипендіат є автором/співавтором або власником/співвласником (для соціально-гуманітарних наук свідоцтва про реєстрацію авторського права на твір)

Таблиця 6

|  |  |
| --- | --- |
| №  з/п | Повні дані про отримані патенти України/інших країн на винахід та інші охоронні документи на об’єкти права інтелектуальної власності (ОПІВ) з веб-адресою електронної версії |
|  | Дані відсутні |

2.7. Подані заявки на отримання державних та/або міжнародних наукових грантів автором (керівником) яких був стипендіат

Таблиця 7

|  |  |
| --- | --- |
| №  з/п | Повні дані про подані заявки на отримання державних та/або міжнародних наукових грантів автором (керівником) яких був стипендіат |
|  | Дані відсутні |

2.8. Інші здобутки стипендіата, суспільний вплив, рівень використання і значимість отриманих наукових результатів стипендіата тощо

(до 100 рядків тексту у довільній формі)

Забруднення поверхневих вод важкими металами - глобальна екологічна проблема, особливо акцентована в контексті подій в Україні, пов’язаних зі вторгненням росії. Тому питання розробки ефективних сенсорних систем для ідентифікації іонів важких металів є особливо актуальним. Використання сенсорних систем на основі фунціоналізованих наноалотропів вуглецю та білкових нанофібрил, отриманих із промислових та харчових відходів, є вкрай перспективним, що потребує поглиблення знань про ці системи в цілому та чіткого розуміння механізмів їх взаємодії з іонами металів. Перед тим як створювати системи на основі білків та вуглецевих матеріалів для виявлення та видалення важких металів, важливо оцінити афінність зв’язування металів та можливі взаємодії за допомогою комп'ютерних методів, що і було проведено за підзвітний період. Зокрема було встановлено, що розмір, форма та поверхневі властивості вуглецевих матеріалів та білків суттєво впливають на здатність білок-вуглецевих наноматеріалів взаємодіяти з різними важкими металами. На основі розрахункових методів було відібрані можливі наносистеми для подальшого експериментального дослідження, що буде проведено у другому підзвітному періоді.

**3. ДИНАМІКА ОСНОВНИХ НАУКО-МЕТРИЧНИХ ПОКАЗНИКІВ**

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| Показник | | | Кількісні показники на момент подання | Кількісні показники  за звітний період  (перше півріччя) | Кількісні показники  за звітний період  (друге півріччя) | | Кількісні показники  за звітний період  (третє півріччя) | Кількісні показники  за звітний період  (четверте півріччя) | |
| 1 | | h-індекс стипендіата в базі даних WebofScience, або Scopus | 11 | 12 |  | |  |  | |
| 1.1 | | у т.ч. без самоцитувань та цитувань співавторів | 9 | 10 |  | |  |  | |
| 2 | Сумарна кількість цитувань наукових публікацій у базі даних WebofScience або Scopus | | 288 | 309 |  | |  |  | |
| 2.1 | у т.ч. без  самоцитувань та цитувань співавторів | | 200 | 219 |  | |  |  | |
| Стипендіат  Ольга Житняківська  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ | | | | | | Проректор з наукової роботи ЗВО (директор НУ)  \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ | | |
| (прізвище, ім'я) | | | | | | (прізвище, ім'я) | | |

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

(підпис, дата) (підпис, дата)

М. П.