Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U003672

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-09-2025

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бутович Галина Анатоліївна
2. Halyna Butovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2886-1323

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: фізика та астрономія

Дата захисту: 03-10-2025

Спеціальність за освітою: прикладна математика

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 10844

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Англійська

Коди тематичних рубрик: 29.29.19, 31.15.15.07, 31.15.15.09

Тема дисертації:

1. Комп'ютерне моделювання полімерно-ферментних комплексів та хелатних структур іонів важких металів
2. Computer Simulations of Polymer-Enzyme Complexes and Chelate Structures of Heavy Metal Ions

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена вивченню утворення комплексів в полімерно-ферментних сумішах та хелатних структур іонів важких металів. Зв'язування молекул ферментів із полімерними ланцюгами-каркасами, яке відіграє важливу роль у біокаталітичних процесах при виробництві біопалива, було вивчене в рамках крупнозернистої моделі за допомогою комп'ютерного моделювання методом ланжевенової динаміки. Формування хелатних комплексів іонів важких металів у воді, що становлять інтерес з точки зору очищення стічних вод, досліджувалося на атомістичному рівні деталізації з використанням методів класичної молекулярної динаміки та квантово-хімічного моделювання, застосовуючи теорію функціоналу густини.

2. This thesis is devoted to the study of complex formation in polymer-enzyme mixtures and the chelate structures of heavy metal ions. The binding of enzyme molecules to polymer chain scaffolds, which plays an important role in biocatalytic processes during biofuel production, was investigated using a coarse-grained model and computer

simulations based on Langevin dynamics. The formation of heavy metal chelation complexes in an aqueous environment, relevant to wastewater treatment, was studied at the atomistic level using classical molecular dynamics (MD) and by quantum-chemical modelling using the density functional theory (DFT).

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Широке застосування технологій більш чистого виробництва та охорони навколишнього природного середовища

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- H. Butovych, Y.V. Kalyuzhnyi, T. Patsahan, J. Ilnytskyi, Modeling of polymer- enzyme conjugates formation: Thermodynamic perturbation theory and computer simulations, Journal of Molecular Liquids, 2023, Volume 385, 122321.Q1
- H. Butovych, F. Keshavarz, B. Barbiellini, E. Lähderanta, J. Ilnytskyi, T.Patsahan, Role of EDTA protonation in chelation-based removal of mercury ions from water, Physical Chemistry Chemical Physics, 2024, Volume 26, 25402-25411.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість: поліпшення стану навколишнього середовища

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пацаган Тарас Миколайович

2. Taras M. Patsahan

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.д., 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7870-2219

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7801655813; Web of Science Researcher ID: V-8175-2017; https://scholar.google.com/citations?hl=uk&user=xX7KLoEAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лахдеранта Еркки --

2. Erkki Lähderanta

Кваліфікація: д.філософ, професор

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-1596-2849

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Технологічний університет Лаппеенранти-Лахті

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: Yliopistonkatu 34, Lappeenranta, 53850, Фінляндія

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: 0208vgz68

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Перепелиця Сергій Миколайович

2. Sergiy M. Perepelytsya

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9064-4234

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: вул. Метрологічна, Київ, 03143, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Грібар-Лі Барбара --

2. Barbara Hribar-Lee

Кваліфікація: д.філософ, професор

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9029-588X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Люблянський університет

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: Kongresni trg 12 1000 Ljubljana, Ljubljana, 1000, Словенія

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: 05njb9z20

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Баумкетнер Андрій Богданович
2. Andrii B. Baumketner

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.24

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2726-931X

Додаткова інформація: https://scholar.google.com.ua/citations?user=c75fXUgAAAAJ&hl=uk

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гайдуківська Христина Аркадіївна
2. Khristine Haydukivska

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3118-7010

Додаткова інформація: https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=54950195200; https://scholar.google.com.ua/citations?user=V6d_8QoAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем імені І. Р. Юхновського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, Львів, 79011, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Головач Юрій Васильович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Головач Юрій Васильович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Бутович Галина Анатоліївна
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна