Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U102565

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ушакова Людмила Миколаївна

2. Ushakova Lyudmyla Mykolaivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 11-05-2021

Спеціальність за освітою: 8.04020301 - фізика

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, м. Київ, 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, м. Київ, 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, м. Київ, 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Адсорбційні комплекси N-ацетилнейрамінової кислоти з моно- і дисахаридами та високодисперсним кремнеземом

2. Adsorption complexes of N-acetylneuraminic acid with mono- and disaccharides and ultrafine silica

Реферат/анотація:

1. Проведена адсорбція N-ацетилнейрамінової (NANA) кислоти на поверхні високодисперсного кремнезему (ВДК) методом послідовного закріплення та адсорбції із бінарного розчину. Згідно першого – взаємодія відбувається на попередньо модифікованій сахарозою чи лактозою поверхні гідроксильованого ВДК. Отримані дані вказують, що адсорбція із бінарного розчину NANA з дисахаридом має більшу ефективність. Методом температурно-програмованої десорбційної мас-спектрометрії доведено утворення адсорбційних комплексів NANA як на гідроксильованій поверхні ВДК, так і на модифікованій сахарозою та лактозою. Результати квантовохімічних розрахунків методом DFT (B3LYP, 6-31 G (d, p) енергії утворення адсорбційних комплексів моносахаридів (глюкози та фруктози) на поверхні гідроксильованого кремнезему з урахуванням впливу розчинника в супермолекулярному та континуальному наближеннях свідчать про неможливість

їхньої адсорбції. Аналогічні розрахунки для дисахаридів (сахароза, лактоза) дають значення Eads 33,0 та 24,5 кДж/моль, відповідно, що свідчить про самочинність процесу адсорбції. Для NANA адсорбція з водного розчину на гідроксильованій поверхні ВДК неможлива, оскільки розрахована величина Eads має майже нульове значення і не залежить від розміру гідратуючого кластера. Ключові слова: N-ацетилнейрамінова кислота, моносахариди, дисахариди, поверхня кремнезему, адсорбція, ТПД МС, кластер води, метод теорії функціоналу густини.

2. The N-acetylneuraminic acid (NANA) molecule plays an important role in intercellular interactions and in cell interactions with drugs. Therefore, when developing drugs where ultrafine silica (UFS) is the carrier, it is important to fix NANA on its surface. But this sialic acid is not adsorbed on the hydroxylated of UFS surface from aqueous solution. Thus it is important to find such UFS surface modifiers which, on the one hand, should ensure the fixation of NANA on the UFS surface, and on the other be biocompatible with the plasma membrane of the cell. Such requirements are met by saccharides but as it is known from literature, monosaccharides are not adsorbed on the surface of UFS, while the adsorption of disaccharides occurs from aqueous solution. Therefore, the first part of the work demonstrates the modification of the UFS surface by adsorption of sucrose and lactose from aqueous solution. It was established that the filling of the surface with adsorbate molecules goes with their placement of molecules in a chain variant. The obtained adsorption isotherm, according to Giles' classification, belongs to class S2. The results of temperature-programmable desorption mass spectrometry found that during thermal decomposition of sucrose samples in both condensed and adsorption states on the UFS surface, the corresponding spectra contain lines inherent in both states (m / z 17, 28, 44, 97). This demonstrates the adsorption of carbohydrate on the surface of silica. A similar conclusion holds for lactose. It was found that the thermal decomposition of NANA samples in the condensed state and the state adsorbed on the modified UFS surface has three stages. The first of them begins at 90, the second - at 230, and the third - 350 □C. The calculation results in the approximation of DFT (B3LYP, 6-31 G (d, p) energy of dimerization and formation of adsorption complexes with silica monosaccharides (glucose and fructose) and NANA for gas phase conditions indicate the interaction of substances in a mixture of NANA with monosaccharides compared to interaction of individual substances. Molecules of disaccharides, N-acetylneuraminic acid and silica form triple complexes due to intermolecular hydrogen bonds between polar functional (mainly -OH groups) molecules of the studied substances. Sucrose is better adsorbed on the surface of silica (ΔEads = −211.7 kJ/mol) compared to the adsorption of lactose (154.9 kJ/mol). The most energy is released (245.2 kJ/mol) when interacting with a silica cluster of the intermolecular complex of N-acetylneuraminic acid and sucrose where silica and the sucrose molecule are in direct contact. The quantum chemical calculations of the equilibrium spatial structure and energy of formation of disaccharides adsorption complexes with the influence of solvent in supermolecular and continuum approximations taken into account, showed that their adsorption is thermodynamically possible and does not depend on the size of the hydrating cluster. Thus Eads for sucrose and lactose is −33.0 and −24.5 kJ/mol, respectively. The adsorption energy from the aqueous phase for glucose and fructose has positive values (+9.8 and + 2.7 kJ/mol). For N-acetylneuraminic acid molecule, taking into account the effect of the solvent for Eads is −1.3 and 0.9 kJ/mol for the reaction with five and eight molecules of water, respectively. It was found that in the aqueous solution in the presence of sucrose on the surface of silica, the hydration energy decreases (i.e. it is easier to replace the N acetylneuraminic acid molecule with a cluster of water from the surface of the modified adsorbent) thereby contributing to NANA adsorption on the silica surface. I.e. here we can see the mutual influence of substances in the mixture of NANA with carbohydrates on the interaction with silica in comparison with the interaction of substances with silica separately. Key words: N-acetylneuraminic acid, monosaccharides, disaccharides, silica surface, adsorption, TPD MS, water cluster, method of density functional theory

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лобанов Віктор Васильович

2. Lobanov Viktor

Кваліфікація: д.х.н., 01.04.18

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Соляник Людмила Олексіївна

2. Solyanyk Lyudmyla Oleksiivna

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Прилуцький Юрій Іванович

2. Prylutskyy Yuriy Ivanovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Картель Микола Тимофійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Картель Микола Тимофійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.