Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0518U002634

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-12-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Степаньян Степан Григорович
2. Stepanian Stepan Grugorovuch

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.14

Назва наукової спеціальності: Теплофізика та молекулярна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 20-11-2018

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, 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 64.175.03

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, 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: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29, 29.29.19, 29.29.25, 29.29.43

Тема дисертації:

1. Молекулярна структура конформаційно лабільних біологічних сполук ізольованих в низькотемпературних матрицях інертних газів

2. Molecular structure of flexible biological compounds isolated in low temperature inert gas matrices

Реферат:

1. Дисертація присвячена дослідженню залежності між молекулярною структурою та термодинамічними і ІЧ спектральними характеристиками конформаційно лабільних біологічних молекул, зокрема амінокислот та їх похідних у ізольованому стані. Для вирішення проблеми дослідження був використаний комплексний експериментально-розрахунковий підхід, що поєднував унікальну методику низькотемпературної ІЧ-спектроскопії матрично-ізольованих сполук та сучасні квантово-механічні методи розрахунків. В результаті було визначено повний набір конформерів молекулярних форм низки аліфатичних амінокислот та їх похідних та визначені заселеності спостережуваних конформерів. Також встановлена відповідність конформерів молекулярної форми амінокислот структурі амінокислотних фрагментів пептидів та виявлено визначальний вплив типу внутрішньомолекулярного водневого зв'язку на структуру і відносні стабільності

конформерів амінокислот та показано, що використовуючи ІЧ-спектральні характеристики конформерів можливо визначати тип водневих зв'язків у амінокислотах. З'ясовано механізм впливу конформаційного охолодження у матрицях на суттєву різницю між конформаційним складом амінокислот у газовій фазі та в ізольованому стані. Показана можливість розділення проявів матричних ефектів і конформаційного розщеплення в ІЧ-спектрах на підставі квантово-механічного моделювання фрагментів кристалів інертних газів та з'ясовано причини якісних змін поверхні потенційної енергії лабільних молекул у матрицях, таких як поява додаткових конформерів та реверсу стабільності конформерів у порівнянні з газовою фазою.

2. The thesis describes results of a combined experimental and computational study of molecular structure of highly flexible molecules of biological importance – natural amino acids and related compounds. The main aim of the research was to establish dependency between molecular structure, IR spectroscopic and thermodynamic characteristics of the molecules. To achieve the aim we used the IR spectroscopy of the molecules isolated in low temperature inert gas crystals (matrices) and high level ab initio computational methods. As a result, a complete set of conformers of the molecular forms of a number of aliphatic amino acids and their derivatives was determined the populations of the observed conformers were defined. The correspondence of conformers of the molecular form of amino acids to the structure of the amino acid fragments of peptides is established. The decisive influence of the type of intramolecular hydrogen bond on the structure and relative stability of amino acid conformers has been established and it has been shown that using the IR spectral characteristics of conformers it is possible to determine the type of hydrogen bonds in amino acid molecules. The mechanism of the conformational cooling effect in the matrices was found out for the significant difference between the conformational composition of amino acids in the gas phase and in the matrix isolated state. The possibility of separating the manifestations of matrix effects and conformational splitting in IR spectra is shown on the basis of quantum-mechanical modeling of fragments of inert gas crystals. The reasons for qualitative changes of the potential energy surface of flexible molecules in matrices, such as the appearance of additional conformers and the reverse of the conformer stability in comparison with the gas phase, were found.

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. Степаньян Степан Григорович

2. Stepanian Stepan Grugorovuch

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.14

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. Степаньян Степан Григорович
2. Stepanian Stepan Grugorovuch

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.14

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. Петров Ельмар Григорович
2. Petrov Elmar Grugorovuch

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лисецький Лонгін Миколайович
2. Lisetski Longin

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.14, 01.04.15

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. Дорошенко Ірина Юріївна
2. Doroshenko Iryna

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.14

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 Найдюк Юрій Георгійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Стржемечний Михайло Олексійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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