Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0520U101369

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-09-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ніколаєнко Тимофій Юрійович
2. Nikolaienko Tymofii Yu.

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 03.00.02

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

Шифр наукової спеціальності: 03.00.02

Назва наукової спеціальності: Біофізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 15-09-2020

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.08

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29

Тема дисертації:

1. Квантово-механічне визначення зарядів атомів, їх ковалентної та електростатичної взаємодії в біомолекулах

2. Quantum-mechanical determination of the charges of atoms, their covalent and electrostatic interaction in biomolecules

Реферат/анотація:

1. Проведено квантово-механічний аналіз поділу електростатичної складової енергії міжмолекулярної взаємодії на складові, локалізовані у відповідності до графу ковалентних зв'язків молекули. Досліджено вплив конформації біомолекул на ефективні заряди їхніх атомів та порядки зв'язків. Створено нові моделі та методи для одержання локалізованих орбіталей, придатних для аналізу електронної структури біомолекул, апроксимації їх зведеної одночастинкової матриці густини, поділу одноелектронних фізичних властивостей і густини заряду на локалізовані складові, що відповідають моделі Льюїса. Охарактеризовано вплив електронного спряження на статистичні характеристики розподілів довжин ковалентних зв'язків. Розроблено числові алгоритми та комп'ютерні програми для реалізації створених методів аналізу

електронної структури біомолекул. Розроблені методи можуть знайти подальше використання при створенні нових та параметризації існуючих силових полів при молекулярно-динамічному моделюванні біомолекулярних систем, побудові напівемпіричних моделей електронної структури таких систем та статистичному прогнозуванні їхніх фізико-хімічних властивостей, що мають біологічний сенс.

2. The thesis is devoted to the quantum-mechanical analysis of the decomposition of electrostatic component of intermolecular interaction energy into the contributions localized in accordance with the graph of the covalent bonds of a molecule. Molecular dynamic simulations in combination with quantum mechanics methods (DFT, 2nd-order Möller-Plesset perturbation theory, atoms in molecules electron charge density topology analysis method (QTAIM), symmetry-adapted perturbation theory (SAPT), as well as LPO and CLPO orbital localization methods developed in this thesis) were used to investigate the decomposition of one-electron molecular properties of biomolecules into the localized contributions. The conformational dependence of the covalent bonding descriptors obtainable from one-particle density matrix was studied. The values of bond orders for pairs of covalently bonded atoms in different conformers were obtained by Natielo-Medrano, NPA-Weiberg, and Mayer methods in model DNA constituents. Using the method of molecular electrostatic potential approximation, the dependence of atomic charges of canonical 2'-deoxygribonucleotides was investigated. The modification of the principal component regression method was developed to obtain atomic charges from such the observable properties of molecules as the spatial structures and dipole moments of their conformers. The problem of approximating the reduced one-particle density matrix, initially given in the basis of orthonormal functions, by a diagonal part of its expansion over the localized orbitals is formulated, and numerical algorithm as well as its software implementation for finding the localized orbitals (LPOs) as a solution of the formulated problem are created. Modification of the LPO algorithm based on the new conditions for orbitals occupancy and ionicity is developed and implemented in software package JANPA for obtaining the CLPO localized orbitals. These localized orbitals are shown to mimic the electron pairs of the covalent bonds and single-atomic lone pairs, well-known in the classical Lewis model of molecular electronic structure. Basing on the developed methods, a new procedure for finding the covalently bonded atoms and determining their integer-valued bond order from a reduced one-particle density matrix of the molecule is proposed. It is shown that the distribution of the lengths of detected covalent bonds gets close to the normal one after removing the bonds which can be considered as conjugate. In this case, for all bonds their average lengths agree with the corresponding experimental values within one standard deviation. The covalent radii corresponding to single, double and triple bonds were found for atoms of chemical elements H, B, C, N, O, F, Si, P, S, Cl, Ge, As, Se, Br solely from the first-principle data. A new model is proposed for approximating the charge density of a molecule by the sum of the point charges located on atomic nuclei and equal to NPA charges, and of the following localized electronic components, neutralized by the appropriate fraction of nuclear charge – electron pairs of atoms and covalent bonds.

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. Булавін Леонід Анатолійович

2. Bulavin Leonid A.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.14, 01.04.16

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. Булавін Леонід Анатолійович

2. Bulavin Leonid A.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.14, 01.04.16

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. Костерін Сергій Олексійович

2. Kosterin Serhii O.

Кваліфікація: д. б. н., 03.00.04

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. Трусова Валерія Михайлівна

2. Trusova Valeriia M.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 03.00.02

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. Головко Мирослав Федорович

2. Holovko Myroslav F.

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 Булавін Леонід Анатолійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Макарець Микола Володимирович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.