

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U000335

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-01-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ ХНУ ім. В.Н. Каразіна № 0302-Зк/281 від 29.02.2024 р.



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рябенко Юлія Анатоліївна

2. Iuliia Riabenko

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8682-800

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Дата захисту: 08-02-2024

Спеціальність за освітою: Біофізика

Місце роботи здобувача: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ID 3962

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 34.17.03, 29.31.26, 29.33.49, 29.35.15

Тема дисертації:

1. Визначення залишкових рідин біотоксинів методами Раман-спектроскопії
2. Detecting Traces of Biotoxins Through Raman Spectroscopy

Реферат:

1. Рябенко Ю.А. Визначення залишкових рідин біотоксинів методами Раман-спектроскопії. Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали (Галузь знань 10 – Природничі науки). Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України, Харків, 2023. Дисертація присвячена дослідженню та розробці методики одержання композитних матеріалів, які мають метрологічно стійкі параметри, щодо підсилення Раманівського розсіювання складних органічних та біологічних молекул. Ці композити є перспективними для використання, як у біосенсорах, так і в інших виробках для калібрування спектрального обладнання. При цьому важливо, що наведені методи дають можливість отримувати високодобротні резонансні структури, що є стійкі до хімічного та механічного впливу і мають стабільну частоту Фреліха. Сучасні високоточні спектрометричні методи дослідження дають можливість вивчати топологію та конформацію складних молекул. Одним з методів підвищення чутливості спектральних приладів, що надає можливість детектувати речовини в надмалих концентраціях є підсилення поверхнею

комбінаційне розсіювання світла (SERS). В цьому методі зазвичай використовують наночастинки металів розміром від 15-50 нм, а в роботі досліджені наночастинки золота 5-10 нм. Гранули утворюють композитну структуру з прозорим середовищем підкладки, в якій спостерігається смуга плазмового поглинання, відповідна до коливань плазми вільних електронів. Однак існуючі методики сфокусовані на створенні колоїду у розчинах, або на підкладках з міткою без висушування зразка, що не дає можливості отримувати метрологічне стабільний сигнал SERS. Ефект плазмового резонансу та його використання у SERS відомі давно, та інтерес до створення нових метрологічних методик детектування молекул останнім часом суттєво зріс. Композитний матеріал, що утворюється за допомогою лазерної імплантації гранулярної плівки золота у приповерхневий шар плавленого кварцу надає можливість створити метаматеріал стійкий до хімічного та механічного впливу та такий, що має високочастотний резонанс. До цього часу відсутні методики створення таких метрологічно детермінованих композитів. І хоча спроби лазерних термічних імплантацій золота та срібла у приповерхневий шар були здійснені низкою авторів, у дисертації ця методика була вдосконалена та надала можливість створювати метаматеріал з наперед заданими властивостями. Сучасний розвиток чисельного моделювання надає можливості розрахунку фізичних властивостей топологічно складних наноматеріалів. Тому у роботі наведені чисельні розрахунки модового складу складної топології наночастинки золота та ефективного індексу рефракції мод. Також чисельно було розраховане ближнє поле у «гарячій точці» наночастинки золота та було встановлено ефект зв'язування мод між наночастинками та коливальними рівнями енергії молекулярної групи, що відповідає дипольному переходу. Дані було підтверджено в експериментах з багатошаровим складом плівок. Встановлено, що зв'язок спостерігається на відстанях до 50 нм, що відповідає ближній зоні. Встановлено, що на таких відстанях можна використовувати модель дипольного осцилятора для опису наночастинок металів. Чисельні розрахунки молекул відомі давно, але складність біологічних молекул надає можливості представити молекули у вигляді квантово-механічної системи та визначити основні її параметри: тензор поляризованості, квантово-механічні енергетичні рівні та діелектричну проникність металів. Спрощена методика розрахунку діелектричної проникності Родаміну 6G наведена у дисертації та вказано, що таку методику можна застосовувати до великих молекул. Це розширює можливості у чисельному моделюванні підсилення Раманівського розсіювання біологічними молекулами на вискодобротних резонансних системах. Раман-спектроскопія має важливе значення у сучасних біофізичних дослідженнях. Але кількість досліджень вкрай обмежена та не носить системного характеру щодо спектрів токсичних молекул та спектрів речовин, що утворюються у процесі біохімічних реакцій цих токсинів з ферментами, що утворюються під час імунної відповіді. Тому у дисертації наведена методика визначення присутності токсичної речовини Ботулотоксину А у сироватці крові хворих на міастенію.

2. Iuliia Riabenko. Detection of traces of biotoxins using Raman spectroscopy. Qualification scholarly paper: a manuscript. Thesis submitted for obtaining the Doctor of Philosophy in Specialty 105 - Applied Physics and Nanomaterials (Natural Sciences). – V. N. Karazin Kharkiv National University of the Ministry of Education and Science of Ukraine, Kharkiv, 2023. The thesis focuses on the research and development of the method for obtaining composite materials with parameters consistent with metrological standards to enhance Raman scattering of complex organic and biological molecules. These composites are promising for use both in biosensors and in other devices for calibration of spectral equipment. Such methods give an opportunity to obtain high-quality resonant structures resistant to chemical and mechanical influences and possessing a stable Frelich frequency. Modern high-precision spectrometric research methods provide for a better understanding of topology and conformation of complex molecules. One of the methods of increasing the sensitivity of spectral devices is SERS which detects substances in residual concentrations. This method usually employs metal nanoparticles sized 15-50 nm, while the present research uses gold nanoparticles of 5-10 nm. The granules form a composite structure with a transparent substrate, where a plasma absorption band corresponds to plasma oscillations of free electrons. However, the existing techniques are focused on creating a colloid in solutions or on substrates with a label without drying the sample, which does not allow for obtaining a SERS signal consistent with metrological standards. The effect of plasma resonance and its use in SERS have been known for a long time, nevertheless, there has been a growing interest in creating new metrological methods of molecular detection. The composite material

formed by laser implantation of a granular film of gold in the near-surface layer of fused quartz creates a metamaterial resistant to chemical and mechanical influences with a high-Q resonance. Currently, there are no methods able to create composites which would be consistent with metrological standards. Although attempts at laser implantation of gold and silver in the near-surface layer have been made by several authors, the present research improves this technique making it possible to create a metamaterial with predetermined properties. The modern development of numerical modeling provides opportunities to calculate the physical properties of topologically complex nanomaterials. Therefore, the paper presents numerical calculations of modes of complex topology of a gold nanoparticle and the effective refractive index of the modes. The near field in the "hot spot" of a gold nanoparticle was also calculated, and the mode coupling effect was established between the nanoparticles and vibrational energy levels of the molecular group corresponding to the dipole transition. The data was confirmed in experiments with a multilayer composition of films. It was established that coupling is observed at distances up to 50 nm, corresponding to the near-field. Hence, at such distances, the dipole oscillator model can be used to describe metal nanoparticles. Numerical calculations of the molecule properties have been available for some time. Still, the complexity of biological molecules makes it possible to present a molecule as a quantum mechanics system and determine its main parameters: the polarizability tensor, energy levels in quantum mechanics, and dielectric permittivity of metals. The thesis proposes a simplified method for calculating the dielectric constant of Rhodamine 6G, indicating that such a method can be applied to large molecules. This expands the possibilities of numerical modeling of Raman scattering enhancement for biological molecules on high-Q resonant systems. Raman spectroscopy is of paramount importance in modern biophysical research. However, the number of studies available is quite limited and a systematic review could be beneficial in terms of the spectra of toxic molecules and substances formed during biochemical reactions of these toxins with enzymes as part of the immune response. Therefore, the present thesis presents a method for determining the presence of Botulinum toxin A in the blood serum of patients with myasthenia gravis.

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: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Новий напрямок у науці і техніці

Публікації:

- «Resonance light absorption of granular aluminium and silver films placed on a rough sublayer of multilayered ZnS», автори Wan, J., Beloshenko, K. S., Makarovskiy, M., Riabenko, I., Shulga, S., & Prokhorenko, S., журнал «Ukrainian journal of physical optics», DOI:10.3116/16091833/20/1/10/2019; (Scopus, Q4)
- «Permittivity Model Selection Based on Size and Quantum-Size Effects in Gold Films», автори Riabenko, I., Shulga, S., Makarovskii, N. A., & Beloshenko, K., журнал «East European Journal of Physics», DOI:10.26565/2312-4334-2023-3-44; (Scopus, Q4)
- «Calculation of the relative permittivity of Rhodamine 6G using the quantum mechanical method //», автори Riabenko I. A., Shulga S., Beloshenko K. S., журнал «Biophysical Bulletin»; DOI:10.26565/2075-3810-2023-50-01; (Scopus, Q4)

Наукова (науково-технічна) продукція: технології; матеріали

Соціально-економічна спрямованість: поліпшення стану навколишнього середовища; економія матеріалів; поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0118U002033, 0121U112033, 0122U001592

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шульга Сергій Миколайович
2. Sergey Shulga

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9392-9366

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кузьмичов Ігор Костянтинович
2. Igor Kuzmichov

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.03

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6870-5491

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534593

Місцезнаходження: вул. Академіка Проскури, буд. 12, Харків, Харківський р-н., 61085, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пивоваренко Василь Георгійович
2. Vasyl Pivovarenko

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.03**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-6652-2333**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка**Код за ЄДРПОУ:** 02070944**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України**Ідентифікатор ROR:****Рецензенти****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Маслов В'ячеслав Олександрович
2. Vyacheslav Maslov

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.03**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0001-7743-7006**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна**Код за ЄДРПОУ:** 02071205**Місцезнаходження:** майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України**Ідентифікатор ROR:****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Берест Володимир Петрович
2. Volodymyr Berest

Кваліфікація: д. ф.-м. н., доц., 03.00.02**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0001-7779-154X**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна**Код за ЄДРПОУ:** 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Катрич Віктор Олександрович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Катрич Віктор Олександрович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Шевченко Андрій Олександрович

Реєстратор

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна