Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U100275

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-05-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Булгакова Алла Ігорівна
2. Bulhakova Alla I.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 10-05-2023

Спеціальність за освітою: електронні системи

Місце роботи здобувача: Інститут електронної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540008

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 21, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, 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): ДФ 10.104.101

Повне найменування юридичної особи: Інститут електронної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540008

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 21, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, 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 електронної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540008

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 21, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.15.15, 29.29, 29.05

Тема дисертації:

1. Іонізація, фрагментація та збудження молекул глутаміну, глутамінової кислоти і валіну електронним ударом
2. Ionization, fragmentation and excitation of glutamine molecules,of glutaminic acid and valine by electronic impact

Реферат:

1. Булгакова А.І. Іонізація, фрагментація та збудження молекул глутаміну, глутамінової кислоти і валіну електронним ударом. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» (10 – Природничі науки) – Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2022. Дисертацію присвячено комплексним мас-спектрометричним та оптико-спектроскопічним дослідженням молекул амінокислот глутаміну ($C_5H_{10}N_2O_3$), глутамінової кислоти ($C_5H_9NO_4$) і валіну ($C_5H_{11}NO_2$), як неопромінених, так і радіаційно

опромінених. У вступі обґрунтовано актуальність обраної теми дисертаційної роботи, вказано мету, задачі, предмет та об'єкт досліджень. Викладено практичну значимість та наукову новизну отриманих результатів. У першому розділі «Іонізація, фрагментація та збудження молекул електронним ударом» представлено огляд та аналіз методів іонізації, фрагментації та дисоціації молекул, а також збудження молекул електронним ударом. У другому розділі «Експериментальна апаратура та методика досліджень» розглянуто експериментальну установку з монопольним мас-спектрометром MX7304A та загальну схему експерименту. Представлено та описано установку для дослідження оптичних спектрів випромінювання парів молекул, а також установку для опромінювання молекул високоенергетичними електронами мікротрон М-30. Третій розділ «Фрагментація та іонізація молекул глутаміну, глутамінової кислоти і валіну електронним ударом» присвячено безпосередньо опису проведених мас-спектрометричних досліджень виходу позитивних іонів у газовій фазі, утворених внаслідок дисоціативної іонізації молекул глутаміну, глутамінової кислоти та валіну електронним ударом. Детально проаналізовано особливості процесів утворення іонів-фрагментів цих молекул, а також досліджено динаміку виходу іонів-фрагментів в інтервалі температур випаровування вихідної речовини 290-460 К. Описано результати вимірювання енергетичних залежностей повних перерізів іонізації молекул глутаміну, глутамінової кислоти і валіну. Визначено енергію іонізації молекул глутаміну (EIE= 8,64 ± 0,25 еВ), глутамінової кислоти (EIE = 8,86 ± 0,25 еВ) та валіну (8,72 ± 0,22 еВ). Проведено порівняння результатів експериментальних досліджень з теоретичними ab initio розрахунками потенціалів іонізації молекул глутамінової кислоти і глутаміну в адіабатичному наближенні та за енергіями зв'язку HOMO- і LUMO-орбіталей нейтральних молекул, а також з розрахованими сумарними перерізами одноелектронної іонізації обох молекул електронним ударом в Binary-Encounter-Bethe моделі та за формулою Гризінського. Показано, що розраховані перерізи добре узгоджуються з отриманими експериментальними даними. В четвертому розділі «Збудження молекул валіну та глутаміну електронним ударом» описано цикл проведених експериментальних досліджень процесів збудження електронами молекул валіну та глутаміну в газовій фазі. Виміряно оптичні функції збудження найінтенсивніших емісій (спектральних ліній та смуг) випромінювання. Виявлено, що енергетичні пороги для всіх видів емісій знаходяться в межах 10-11 еВ, що, ймовірно, пов'язано з фрагментацією молекули валіну. Встановлено, що внаслідок дисоціації молекул глутаміну найефективніше утворюються молекулярні емісії радикалу OH і деяких інших молекулярних фрагментів, а також реєструються спектральні лінії збуджених атомів водню. Знайдено, що енеретичні пороги збудження молекулярних емісій знаходяться в межах 10-12 еВ, тоді як для атомарних ліній водню – в межах 13-15 еВ. Вперше методом оптичної спектроскопії досліджено процес електронного збудження молекул глутаміну в газовій фазі до і після опромінення зразків (електронами з енергією 11,5 МеВ) на мікротроні М-30 дозами 10 кГр. Для найбільш інтенсивних ліній випромінювання молекулярних фрагментів, що знаходяться в області енергій 4,4-11,8 еВ визначено їх пороги та енергетичні залежності ефективності збудження в діапазоні енергій електронів до 30 еВ. Ідентифіковано процеси та канали, відповідальні за випромінювання. Встановлено, що відмінність характеристичних особливостей оптичних функцій збудження опроміненого глутаміну може бути пов'язана з присутністю в ньому метастабільних станів, які відсутні для неопроміненого зразка. Досліджено роль радіації у формуванні метастабільних молекулярних структур, які визначають особливості оптичних і мас-спектрів опромінених зразків глутаміну. Встановлено, що вибір діапазону енергій скануючого пучка електронів є важливим для діагностики радіаційних ушкоджень амінокислот.

2. Bulhakova A.I. Ionization, fragmentation and excitation of glutamine, glutamic acid and valine molecules by electron impact. – Qualifying scientific work as a manuscript. Thesis is submitted to acquire the scientific degree of Doctor of Philosophy in the specialty 104 "Physics and astronomy". – Institute of Electron Physics NAS Ukraine, Uzhhorod, 2022. The work is devoted to complex mass spectrometric and optical spectroscopic studies of the amino acid molecules glutamine ($C_5H_{10}N_2O_3$), glutamic acid ($C_5H_9NO_4$), and valine ($C_5H_{11}NO_2$), both unirradiated and irradiated. The introduction substantiates the relevance of the chosen topic of the dissertation, indicates the purpose, tasks, subject and object of research. The practical significance and scientific novelty of the obtained results are outlined. The first chapter "Ionization, fragmentation and excitation of molecules by electron impact"

presents an overview and analysis of methods of ionization, fragmentation and dissociation of molecules, as well as excitation of molecules by electron impact. In the second chapter "Experimental equipment and research methods" the experimental setup with the monopole mass spectrometer MX7304A and the general scheme of the experiment are considered. The installation for the study of the optical spectra of the emission of pairs of molecules is presented and described, as well as the installation for the irradiation of molecules with high-energy microtron M-30 electrons. The third chapter " Fragmentation and ionization of glutamine, glutamic acid and valine molecules by electron impact" is devoted directly to the description of mass spectrometric studies of the yield of positive ions in the gas phase, formed as a result of dissociative ionization of glutamine, glutamic acid, and valine molecules by electron impact. The peculiarities of the processes of the formation of fragment ions of these molecules were analyzed in detail, and the dynamics of the release of fragment ions in the range of temperatures of evaporation of the original substance 290-460 K. The results of measuring the energy dependences of the complete ionization cross sections of glutamine, glutamic acid and valine molecules were described. The ionization energy of glutamine molecules (EIE = 8,64 ± 0,25 eV), glutamic acid (EIE = 8,86 ± 0,25 eV), and valine (8.72 ± 0.22 eV) was determined. The results of experimental studies were compared with theoretical ab initio calculations of the ionization potentials of glutamic acid and glutamine molecules in the adiabatic approximation and by the binding energies of HOMO and LUMO orbitals of neutral molecules, as well as with the calculated total cross sections of one-electron ionization of both molecules by electron impact in Binary-Encounter-Bethe model and Gryzinsky's formula. It is shown that the calculated cross sections agree well with the obtained experimental data. The fourth chapter "Excitation of valine and glutamine molecules by electron impact" describes the cycle of conducted experimental studies of processes of electron excitation of valine and glutamine molecules in the gas phase. The optical excitation functions of the most intense emissions (spectral lines and bands) of radiation were measured. It was found that the energy thresholds for all types of emissions are within 10-11 eV, which is associated with the fragmentation of the valine molecule. It was established that due to the dissociation of glutamine molecules, molecular emissions of the OH radical and some other molecular fragments are most efficiently formed, and spectral lines of excited hydrogen atoms are also recorded. It was found that the energetic excitation thresholds of molecular emissions are within 10-12 eV, while for atomic lines of hydrogen – within 13-15 eV. For the first time, the process of electronic excitation of glutamine molecules in the gas phase before and after irradiation of samples (with electrons with an energy of 11,5 MeV electrons) on the M-30 microtron with doses of 10 kGy was investigated by the method of optical spectroscopy. For the most intense emission lines of molecular fragments, located in the energy range of 4.4-11.8 eV, their thresholds and energy dependences of the excitation efficiency in the range of electron energies up to 30 eV were determined. Processes and channels responsible for radiation have been identified. It was established that the difference in the characteristic features of the optical excitation functions of irradiated glutamine can be associated with the presence of metastable states in it, which are absent in the non-irradiated sample. The role of radiation in the formation of metastable molecular structures, which determine the features of the optical and mass spectra of irradiated glutamine samples, was studied. It has been established that the choice of the energy range of the scanning electron beam is important for the diagnosis of radiation damage to amino acids.

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. Завілопуло Анатолій Миколайович
2. Zavilopulo Anatoliy M.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.04

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. Островерх Анна Сергіївна
2. Ostroverkh Anna Serhiyivna

Кваліфікація: д. т. н., 05.02.01

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. Шафраньош Іван Іванович

2. Shafranyosh Ivan Ivanovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Роман Вікторія Іванівна

2. Roman Viktoriia I.

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.04

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. Вукстич Василь Степанович

2. Vukstych Vasyl S.

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Боровик Олександр Олександрович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Боровик Олександр Олександрович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.