

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U101041

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-10-2023

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Єлагіна Наталія Володимирівна

2. Nataliya V. Yelagina

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 102

Назва наукової спеціальності: Хімія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Фізична хімія, хімія поверхні

Дата захисту: 21-11-2023

Спеціальність за освітою: Фармація

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

Код за ЄДРПОУ: 03291669

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 26.210.2312

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, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.15.

Тема дисертації:

1. Нанокompозитні системи на основі гідроусільнених кремнеземів та їх властивості
2. Nanocomposite systems based on compacted silica and their properties

Реферат:

1. Метою роботи є створення наукових основ для використання гідрофобного кремнезему в композитах медичного призначення на основі нанокремнеземів і гідрофільних біоматеріалів, таких як бурштинова кислота, природний бурштин, дисперговані гриби *Amanita muscaria*, альгінова кислота. Актуальність: в даний час майже не вивчена можливість створення біонанокompозитних систем, в яких використовуються гідрофобні кремнеземи. Поєднання в одній системі гідрофобних та гідрофільних матеріалів має як загальнонауковий, так і практичний інтерес, оскільки взаємодія гідрофобних та гідрофільних частинок в сухому вигляді відбувається за рахунок ван-дер-ваальсових зв'язків. При переведенні цих композитних частинок у водне середовище відбуваються процеси їх гідратації, які з термодинамічної точки зору керуються принципом мінімізації вільної енергії системи вода-тверде тіло. Методи: низькотемпературна ¹H ЯМР спектроскопія, твердотільна ЯМР спектроскопія, термогравиметрія, ТЕМ та СЕМ мікроскопія, ІЧ-

спектроскопія. Для приготування зразків використовували метод змочування-висушування з наступною механохімічною активацією. Даний метод виявився ефективним як для гідрофільних так і для гідрофобних матеріалів, при цьому повітря з міжчастинкового простору гідрофобних матеріалів видалялося шляхом дозованих механічних навантажень в присутності води. У дисертаційній роботі представлені результати дослідження щодо можливості використання гідрофобного кремнезему, в якості компоненти композитних систем біомедичного призначення. Показано, що процес гідратації полягає у формуванні на поверхні системи нанорозмірних кластерів води, які взаємодіють з поверхнею переважно за ван-дер-ваальсовим механізмом, а структура води залежить від гідратованості та наявності додатків органічних речовин. Зроблено припущення, що композитні система АМ-1(А-300)/бурштинова кислота, АМ-1/бурштин та АМ-1(А-300)/*Amanita muscaria*, які потрапляють у рідке середовище шлунково-кишкового тракту завдяки наявності гідрофобного кремнезему, формують на поверхні слизової оболонки міжфазний прошарок кластеризованої води з частково порушеною сіткою водневих зв'язків. Це, з одного боку, може впливати на повноту засвоєння біоактивних речовин, а з другого визначати швидкість їх вивільнення. Таким чином можуть бути створені системи програмованої доставки активних речовин та збільшено їх біодоступність. Показано, що на основі гідрофільного і гідрофобного кремнеземів та їх суміші 1/1, методом дозованих механічних навантажень можуть бути отримані композитні системи з бурштинової кислотою, в яких значна її частина розподіляється в нанорозмірних міжчастинкових зазорах кремнеземів. Залежно від способу приготування композиту змінюються такі текстурні параметри, як питома поверхня і об'єм пор. Адсорбована гідрофобним кремнеземом вода має максимальну міжфазну енергію і знаходиться в кластеризованому стані, причому радіус кластерів не перевищує 10 нм. Ймовірно, зростання величини міжфазної енергії в процесі створення композиту метилкремнезем/Н₂О під впливом високих механічних навантажень, обумовлене переходом води з об'ємного в кластеризований стан. При однаковому вмісті води, міжфазна енергія (пС) метилкремнезему (АМ-1) виявилася в 2,5 рази вище, ніж для створеного на його основі композиту АМ-1/БК/Н₂О, що обумовлено формуванням на поверхні АМ-1 з іммобілізованою БК кластерів води більшого розміру. Таким чином, енергія гідрофобної гідратації метилкремнезему буде вищою, ніж при іммобілізації на його поверхні БК. Запропоновано використання для медичного застосування гриба *Amanita muscaria* в складі нанокompозитної системи з аморфним, високодисперсним гідрофільним і гідрофобним кремнеземами. При цьому передбачається, що основні токсичні компоненти, які в плодovому тілі гриба зв'язані ензимами, будуть адсорбуватися поверхнею кремнезему, що володіє високою спорідненістю до білкових молекул і разом будуть виводитись з організму. Показано, що вода входить до складу гриба або його композиту з нанокремнеземами може перебувати в сильно- і слабоасоційованих станах. Останній стабілізується контактом зі слабополярним середовищем, що моделює гідрофобну частину фосфоліпідних структур слизової оболонки кишечника. Висловлено припущення, що в організмі цей ефект буде підвищувати біодоступність активних речовин, які десорбуються з композитної системи. Для гідратованої альгінової кислоти на відміну від інших вивчених систем заміна повітря середовищем CDCl₃ супроводжується не зменшенням, а збільшенням взаємодії води з поверхнею. Ймовірно, це обумовлено формуванням в міжчастинкових зазорах системи кластерів води, зв'язаної з карбоксильними поверхневими групами кислотних залишків. При цьому проникнення в міжчастинкові зазори молекул хлороформу виявляється термодинамічно не вигідним. Ключові слова: гідрофобний та гідрофільний кремнеземи, бурштин, бурштинова кислота, *Amanita muscaria*, композитні системи, міжфазна енергія, сильно- і слабозв'язана вода, альгінова кислота.

2. The purpose of the work is to create a scientific basis for the use of hydrophobic silica in medical composites based on nanosilica and hydrophilic biomaterials, such as succinic acid, natural amber, dispersed *Amanita muscaria* mushrooms, and alginic acid. The relevance of the work is due to the fact that currently the possibility of creating bionanocomposite systems, which use hydrophobic silicas, has hardly been studied. The issue of combining hydrophobic and hydrophilic materials in one system is of both general scientific and practical interest, since the interaction of hydrophobic and hydrophilic particles in a dry state occurs due to van der Waals bonds. When these composite (hydrophobic-hydrophilic) particles are transferred into an aqueous medium, their hydration processes

take place, which from a thermodynamic point of view are governed by the principle of minimizing the free energy of the water-solid body system. Low-temperature ¹H NMR spectroscopy, solid-state NMR spectroscopy, thermogravimetry, TEM and SEM microscopy and IR spectroscopy were chosen as the main methods of further investigation. The wetting-drying method followed by mechanic and chemical activation was used to freeze the samples. This method was effective for both hydrophilic and hydrophobic materials, while air was removed from the interparticle space of hydrophobic materials by dosed mechanical loads in the presence of water. It is assumed that the composite system AM-1 (A-300)/succinic acid, AM-1/amber and AM-1 (A-300)/Amanita muscaria, which enter the liquid environment of the gastrointestinal tract due to the presence of hydrophobic silica, form an interface layer of clustered water with a partially broken network of hydrogen bonds on the surface of the mucous membrane. This, on the one hand, can affect the complete absorption of bioactive substances, and on the other, determine the speed of their release. In this way, systems of programmed delivery of active substances can be created and their bioavailability can be increased. It is shown that on the basis of hydrophilic and hydrophobic silicas and their 1/1 mixture, composite systems with succinic acid can be obtained by the method of dosed mechanical loads, in which a significant part of it is distributed in nano-sized interparticle gaps of silicas. Depending on the method of preparation of the composite, such textural parameters as specific surface area and pore volume change. Water adsorbed by hydrophobic silica has the maximum interfacial energy and is in a clustered state, and the cluster radius does not exceed 10 nm. Probably, the increase in the value of the interfacial energy in the process of creating the methylsilica/H₂O composite under the influence of high mechanical loads is due to the transition of water from the bulk to the clustered state. With the same water content, the interfacial energy (mJ/m²) of methylsilica (AM-1) was 2.5 times higher than for the AM-1/SA/H₂O composite created on its basis, which is due to the formation on the surface of AM-1 with immobilized BC of larger water clusters. Thus, the energy of hydrophobic hydration of methylsilica will be higher than when immobilized on its BC surface. The use of the mushroom *Amanita muscaria* as part of a nanocomposite system with amorphous, highly dispersed hydrophilic and hydrophobic silica is proposed for medical use. At the same time, it is assumed that the main toxic components, which are bound by enzymes in the fruiting body of the mushroom, will be adsorbed by the surface of silica, which has a high affinity for protein molecules, and will be excreted from body together. It is shown that the water included in the composition of the mushroom or its composite with nanosilicas can be in strongly and weakly associated states, The latter is stabilized by contact with a weakly polar environment that simulates the hydrophobic part of the phospholipid structures of the intestinal mucosa. It is assumed that this effect will increase the bioavailability of active substances desorbed from the composite system in the body. For hydrated alginic acid, in contrast to other studied systems, the replacement of air with CDCl₃ medium is not accompanied by decrease, but an increase in the interaction of water with surface. This is probably due to the formation in the interparticle gaps of a system of water clusters bound to the carboxyl surface groups of acid residues. At the same time, the penetration of chloroform molecules into the interparticle gaps is thermodynamically disadvantageous.

Key words: hydrophobic and hydrophilic silica, amber, succinic acid, *Amanita muscaria*, composite systems, interphase energy, strongly and weakly bound water, alginic acid.

Державний реєстраційний номер ДіР: 0111U008818 0115U004529

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: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Крупская Т.В., Елагина Н.В., Борисенко Н.В., Туров В.В., Паулюс Йоваісас, Рута Біелаускіне. Состояние воды, адсорбированной поверхностью частиц янтаря и его композитной системой с нанокремнеземом, по данным ЯМР-спектроскопии // збірник «Поверхня». 2017. вип. 9 (24). С. 256–267.
- Krupskaya T., Jovaišas P., Bieliauskiene R., Yelahina N., Charmas B., Turov V. Water structure in fungi Amanita muscaria and the ircomposite system with hydrocompacted nanosilica A-300 // Annales universitatis Mariae Curie-Skłodowska, Lublin – Polonia. 2017. Vol. LXXII. P.25–26.
- Крупская Т.В., Гунько В.М., Процак И.С., Елагина Н.В., Туров В.В. Композитные системы на основе янтарной кислоты, иммобилизованной на поверхности пирогенных кремнеземов и их свойства // Теорет. и эксперим. химия. 2020. Т. 56. №1. С. 52–57.
- Крупська Т.В., Єлагіна Н.В., Процак І.С., Туров В.В. Міжфазні явища в композитній системі на основі метилкремнезему та подрібненого гриба Amanita muscaria. // Доповіді НАН України 2020. № 11. С. 61–70 <https://doi.org/10.15407/dopovidi2020.11.061>
- Туров В.В., Гунько В.М. Крупська Т.В., Процак І.С. Андрійко Л.С., Марінін А.І., Головань А.П., Єлагіна Н.В., Картель М.Т. Міжфазні взаємодії гідрофобних порошків на основі метилкремнезему в водному середовищі // збірник «Поверхня» 12 (27) 2020. С.53–99. <https://doi.org/10.15407/Surface.2020.12.053>
- Krupskaya T.V., Yelahina N.V., Morozova L.P., Turov V.V. Peculiarities of alginic acid hydration in the air and in hydrophobic organic environment. // Журнал "Хімія, фізика та технологія поверхні". 2021. Т. 12. № 2. С. 149–154.
- Krupskaya T.V., Gun'ko V.M., Andriyko L.S., Yelahina N.V., Turov V.V. Water Clusterization in the Interparticle Space of Hydrophobic Nanosilica AM-1. // Фізика і хімія твердого тіла. 2021. Т. 22, No 1. С. 24–30.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість: поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0119U100837

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Крупська Тетяна Василівна

2. Tetiana V. Krupska

Кваліфікація: д. х. н., с.д., 01.04.18

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація: Scopus ID 35094109300

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, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Щербань Наталія Дмитрівна
2. Nataliia D. Shcherban

Кваліфікація: д. х. н., с.д., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8767-702X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізичної хімії ім. Л. В. Писаржевського
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417213

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 31, Київ, 03028, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Алексеев Сергій Олександрович
2. Sergei A. Alekseev

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-4190-8528

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. Лобанов Віктор Васильович

2. Victor Lobanov

Кваліфікація: д.х.н., професор, 01.04.18

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3557-1033

Додаткова інформація:

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, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Муха Юлія Петрівна

2. Yuliya P. Mukha

Кваліфікація: д. х. н., с.д., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-4623-5748

Додаткова інформація:

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, Київ, 03164, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

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

Горбик Петро Петрович

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

Горбик Петро Петрович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Дацюк Андрій Михайлович

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна