Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0411U000423

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-02-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Цендра Оксана Михайлівна
2. Tsendra Oksana Mykhailivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 10-02-2011

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

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

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 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, 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 хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

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

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.37.05

Тема дисертації:

1. Моделювання взаємодії кремнезему з деякими компонентами біологічних мембран

2. Simulation of interaction between silica surface and some components of biological membranes

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено теоретичному дослідженню будови адсорбційних комплексів деяких біомолекул плазматичної мембрани з поверхнею кремнезему в газовій фазі та з урахуванням водного середовища. Методами квантової хімії встановлено рівноважні структури адсорбційних комплексів біомолекула-тверде тіло, оцінено їх просторову та електронну будову, досліджено особливості взаємодії біомолекул з гідрофільними та гідрофобними поверхнями. Запропоновано схему та обґрунтовано механізм взаємодії біомолекула-поверхня твердого тіла. На основі запропонованих моделей та квантовохімічних розрахунків пояснено особливості контактної взаємодії біомолекул з поверхнею кремнезему.

2. The thesis is devoted to the study on the characteristics of the interaction of biomolecules, main components of cell membranes, with the surface of silica adsorbents. This interaction is assessed by means of state-of-the-art quantum-chemical methods. The silica surface is simulated by multi-sized clusters resembling the structure of the <111> face of b-cristobalite. The adsorption of dimers of carboxylic acids (formic and acetic) on silica surface was studied theoretically. It was found that silanol groups or surface water disrupt the hydrogen bonds of the dimer

and transform the octatomic structure of the dimers into a decatomic one. The existence of such adsorbed structures was proved by a correlation between calculated and experimentally obtained vibration spectra of the dimers. Hydrated complexes of methylphosphonic acid were also studied as a model of the phosphatidic acids of plasmatic membrane. Their electronic structure and geometry were determined. Tetra-, penta-, and hexahydrate molecular structures were found to coexist with their ion-pair associates. The interconversion between the two forms seems to involve the simultaneous transfer of two protons, a process with a low energy barrier. A special focus is put on the calculation of the equilibrium structures and the energies of formation of adsorption complexes and surface compounds of silica supported carbohydrates (lactose, saccharose), N-acetylneuraminic acid. It was found that the key role in the formation of this surface compounds is played by the formation of hydrogen bonds between the adsorbates and the electron donating silanol groups of silica. The results of calculations show that disaccharides (i.e. saccharose and lactose) can act as mediators of sorption of N-acetylneuraminic acid on silica. Disaccharides have high affinity to silica surface and tend to form complexes with N acetylneuraminic acid. These complexes exhibit higher adsorption heats than that of the acid alone . Finally, the interaction between hydroxylated silica particles and erythrocytes was studied. Both the silica surface and the molecule had negative surface charges due to electrolytic dissociation of surface functional groups. A probable interaction mechanism was suggested and subsequently verified by quantum-chemical calculations. The erythrocyte was represented by a lipid fragment of plasmatic membrane. It was found that at large distances between these negatively charged clusters the derived hydrated cations get between the clusters and promote their interaction. When the distance between objects reaches a critical value the localized negative charges of the silica anion and the lipid complex get saturated with protons from the hydrated cations. The resulting neutral components of the disperse system interact in such a way that water molecules get involved as intermediates of a network of hydrogen 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. Лобанов Віктор Васильович
2. Lobanov Victor Vasyl'ovych

Кваліфікація: д.х.н., 01.04.18

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. Соловйов Веніамін Васильович

2. Соловйов Веніамін Васильович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Ільченко Микола Миколайович

2. Ільченко Микола Миколайович

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.18

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 Гунько Володимир Мусійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Гунько Володимир Мусійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.