

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U002270

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-06-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ № 370-34 від 22.07.2024



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Онук Марта Миколаївна

2. Marta M. Onuk

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: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Фізика та астрономія

Дата захисту: 04-07-2024

Спеціальність за освітою: Фізика та астрономія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): 5738

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:

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, буд. 60, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19

Тема дисертації:

1. Вплив оточення на структуру та властивості воднево-зв'язаних кластерів
2. Environment influence on the structure and properties of hydrogen bonded clusters

Реферат:

1. Шляхом поєднання методів коливальної спектроскопії, низькотемпературної матричної ізоляції та квантово-хімічних розрахунків, а також вимірювання густини проаналізовано вплив молекулярного оточення на структуру воднево-зв'язаних кластерів метанолу, пропанолу, диметилсульфоксиду; досліджено вплив домішок холестерину та мелатоніну на структуру та властивості модельної ліпідної мембрани, визначено температурну залежність парціальних молярних об'ємів водних розчинів солей при нескінченному розведенні та вивчено їхні енергетичні, термодинамічні та спектральні характеристики. Метою роботи є визначення впливу молекулярного оточення на структуру та властивості систем з міжмолекулярним водневим зв'язком та його проявів у коливальних спектрах.

2. Through a combination of infrared (IR) absorption and Raman methods, the method of low-temperature matrix isolation and quantum-chemical calculations, as well as the method of density measurements, the influence of the

environment on the structure of methanol clusters, the conformational composition of propanol in the gaseous state and in the low-temperature argon matrix was analyzed; intermolecular interaction in dimethyl sulfoxide (DMSO) and its manifestation in vibrational spectra; temperature dependence of partial molar volumes of aqueous solutions of salts and their ions at infinite dilution and their energetic, thermodynamic and spectral characteristics were studied. The influence of low-temperature argon matrix on the structure and dynamics of clusters of one-atom alcohols embedded in it has been investigated using computer modeling methods.

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: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Bulavin, L. A., D. V. Soloviov, O. I. Ivankov, I. Y. Doroshenko, M. M. Onuk, T. Y. Nikolaenko. "Cholesterol and Melatonin Exert Opposite Effects on the Interaction of Model DMPC Membranes with the SARS-CoV-2 S₀Protein: A SANS Study". *Macromolecular Symposia*. Vol. 408 (2023): 2200029.
- Jumabaev, A., N. Hushvaktov, B. Khudaykulov, A. Absanov, M. Onuk, I. Doroshenko, L. Bulavin. "Formation of Hydrogen Bonds and Vibrational Processes in Dimethyl Sulfoxide and Its Aqueous Solutions: Raman Spectroscopy and Ab Initio Calculations". *Ukrainian Journal of Physics*. T. 68, №6 (2023): 375-375.
- Doroshenko, Iryna, M. Onuk, L. Meyliev, B. Kuyliev. "Conformational composition of propanol in gaseous state and in matrix isolation". *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. V. 747(1) (2022): 81-90.
- Соловійов Д.В., Іваньков О.І., Булавін Л.А., Дорошенко І.Ю., Онук М.М. "Дослідження структурних особливостей взаємодії S-протеїну SARS-CoV-2 з ліпідними мембранами методом малокутового розсіяння нейтронів". *Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Серія фізико-математичні науки*, №2 (2021): 127-130.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дорошенко Ірина Юріївна
2. Iryna Y. Doroshenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0743-2899

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:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хорольський Олексій Вікторович

2. Oleksii V. Khorolskyi

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Полтавський національний педагогічний університет імені В. Г. Короленка

Код за ЄДРПОУ: 31035253

Місцезнаходження: вул. Остроградського, буд. 2, Полтава, Полтавський р-н., 36003, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гнатюк Олена Петрівна

2. Olena P. Hnatyuk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 46, Київ, 03680, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Науменко Антоніна Прокопіївна
2. Antonina P. Naumenko

Кваліфікація: к. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лазаренко Максим Михайлович
2. Maksym M. Lazarenko

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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:

VIII. Заключні відомості

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

Дмитрук Ігор Миколайович

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

Дмитрук Ігор Миколайович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

Денисова Наталія Анатоліївна

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна