

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U005103

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-09-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Піддубний Тимофій Юрійович

2. Tymofii Y. Piddubnyi

Кваліфікація: 104

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0000-9770-3623

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

Дата захисту: 15-10-2026

Спеціальність за освітою: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Місце роботи здобувача: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61103, 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): PhD 17020

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61103, 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: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19.04, 29.31.27, 34.17.15, 29.29.43, 29.41.01

Тема дисертації:

1. Структура комплексів 2D-наноматеріалів з біологічними молекулами
2. Structure of 2D nanomaterial complexes with biological molecules

Реферат/анотація:

1. У дисертаційній роботі представлені результати досліджень структури та міжмолекулярної взаємодії у наноконкомплексах дисульфиду молібдену (MoS₂) з біологічними молекулами (основи нуклеїнових кислот (ОНК)), лікарські препарати ламівудин та тегафур). Було вперше використано метод теорії функціоналу густини для встановлення впливу трьох типів міжмолекулярних взаємодій – ковалентних координаційних зв'язків, водневих зв'язків та дисперсійної взаємодії – на структуру, стабільність та спектральні характеристики комплексів. Окремо досліджено вплив структурних дефектів MoS₂ на міжмолекулярну взаємодію та коливальні спектри. Показано, що саме утворення координаційних зв'язків викликає найсильніші характеристичні спектральні зміни в досліджуваних наноконкомплексах. Розроблено практичні рекомендації щодо методів підготовки зразків для експериментальної реєстрації інфрачервоних та раманівських спектрів комплексів MoS₂ з біологічними молекулами. Для канонічних ОНК встановлені

спектральні маркери взаємодії з MoS₂. У вступі коротко обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи як у фундаментальному, так і у прикладному аспектах, визначено мету, завдання, об'єкти, предмет та методи дослідження. Сформульовано наукову новизну та описано практичне значення отриманих результатів. Наведено відомості про публікації, особистий внесок здобувача та апробацію результатів дисертації. Також наведено інформацію про структуру та обсяг представленої дисертаційної роботи. У першому розділі представлено огляд літератури за темою дисертації. В огляді розглянуті відомі результати щодо структури та властивостей одношаровий двовимірних (2D) дихальогенідів перехідних металів (ДПМ). У другому розділі детально описано методи проведення розрахункових досліджень структури, стабільності та коливальних спектрів MoS₂ з біологічними молекулами. Обґрунтовано вибір найбільш оптимального функціоналу густини, а також базисних наборів для кожного типу атомів у досліджених системах. Третій розділ присвячено дослідженню змін у ІЧ та раманівських спектрах ОНК при їх взаємодії з MoS₂ та ідентифікації характеристичних спектральних маркерів цієї взаємодії. Аналіз отриманих результатів дозволив виявити унікальні спектральні маркери для кожної ОНК. Також у третьому розділі представлені результати досліджень впливу точкових дефектів MoS₂ на коливальні спектри комплексів з пуриновими ОНК. Встановлено, що основний внесок у енергію взаємодії (75–90%) дає утворення координаційних зв'язків. Показано кореляцію енергій взаємодії зі значеннями індексів зв'язків Віберга. У четвертому розділі представлені результати досліджень комплексів тегафуру та ламівудину з фрагментами MoS₂. Розрахунки нековалентних та ковалентних комплексів виконувались як для неушкодженого MoS₂, так і для MoS₂ з точковими дефектами поверхні. Також було розраховано та проаналізовано ІЧ- та раманівські спектри комплексів. У результаті були виявлені характерні спектральні прояви взаємодій між молекулами лікарських препаратів та MoS₂. Розрахунки виконано як у вакуумному наближенні, так і з урахуванням водного середовища. Визначено вплив водного середовища на енергії взаємодії та спектральні характеристики досліджуваних комплексів. Дисертаційна робота представляє оригінальні результати з дослідження міжмолекулярних взаємодій у системах на основі MoS₂ та біологічних молекул (основ нуклеїнових кислот та лікарських препаратів). За допомогою квантово-механічного методу теорії функціоналу густини встановлено механізми впливу координаційних зв'язків, водневих та стекінг-взаємодій на структурну стабільність і коливальні характеристики таких комплексів. Виявлено фундаментальну роль точкових дефектів поверхні MoS₂ у формуванні ковалентних координаційних зв'язків, що суттєво змінюють електронну структуру та спектральні маркери досліджуваних біомолекул. Отримані дані щодо енергії взаємодії та спектральних проявів є теоретичним підґрунтям для розробки нових біосенсорних пристроїв та систем цільової доставки фармакологічних агентів, а також можуть бути використані для калібрування силових полів у подальших розрахунках методом молекулярної-динаміки.

2. У дисертаційній роботі представлені результати досліджень структури та міжмолекулярної взаємодії у наноконкомпексах дисульфиду молібдену (MoS₂) з біологічними молекулами (основи нуклеїнових кислот (ОНК)), лікарські препарати ламівудин та тегафур). Було вперше використано метод теорії функціоналу густини для встановлення впливу трьох типів міжмолекулярних взаємодій – ковалентних координаційних зв'язків, водневих зв'язків та дисперсійної взаємодії – на структуру, стабільність та спектральні характеристики комплексів. Окремо досліджено вплив структурних дефектів MoS₂ на міжмолекулярну взаємодію та коливальні спектри. Показано, що саме утворення координаційних зв'язків викликає найсильніші характеристичні спектральні зміни в досліджуваних наноконкомпексах. Розроблено практичні рекомендації щодо методів підготовки зразків для експериментальної реєстрації інфрачервоних та раманівських спектрів комплексів MoS₂ з біологічними молекулами. Для канонічних ОНК встановлені спектральні маркери взаємодії з MoS₂. У вступі коротко обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи як у фундаментальному, так і у прикладному аспектах, визначено мету, завдання, об'єкти, предмет та методи дослідження. Сформульовано наукову новизну та описано практичне значення отриманих результатів. Наведено відомості про публікації, особистий внесок здобувача та апробацію результатів дисертації. Також наведено інформацію про структуру та обсяг представленої дисертаційної роботи. У першому розділі представлено огляд літератури за темою дисертації. В огляді розглянуті відомі результати

щодо структури та властивостей одношаровий двовимірних (2D) дихалькогенідів перехідних металів (ДПМ). У другому розділі детально описано методи проведення розрахункових досліджень структури, стабільності та коливальних спектрів MoS₂ з біологічними молекулами. Обґрунтовано вибір найбільш оптимального функціоналу густини, а також базисних наборів для кожного типу атомів у досліджених системах. Третій розділ присвячено дослідженню змін у ІЧ та раманівських спектрах ОНК при їх взаємодії з MoS₂ та ідентифікації характеристичних спектральних маркерів цієї взаємодії. Аналіз отриманих результатів дозволив виявити унікальні спектральні маркери для кожної ОНК. Також у третьому розділі представлені результати досліджень впливу точкових дефектів MoS₂ на коливальні спектри комплексів з пуриновими ОНК. Встановлено, що основний внесок у енергію взаємодії (75–90%) дає утворення координаційних зв'язків. Показано кореляцію енергій взаємодії зі значеннями індексів зв'язків Віберга. У четвертому розділі представлені результати досліджень комплексів тегафуру та ламівудину з фрагментами MoS₂. Розрахунки нековалентних та ковалентних комплексів виконувались як для неушкодженого MoS₂, так і для MoS₂ з точковими дефектами поверхні. Також було розраховано та проаналізовано ІЧ- та раманівські спектри комплексів. У результаті були виявлені характерні спектральні прояви взаємодій між молекулами лікарських препаратів та MoS₂. Розрахунки виконано як у вакуумному наближенні, так і з урахуванням водного середовища. Визначено вплив водного середовища на енергії взаємодії та спектральні характеристики досліджуваних комплексів. Дисертаційна робота представляє оригінальні результати з дослідження міжмолекулярних взаємодій у системах на основі MoS₂ та біологічних молекул (основ нуклеїнових кислот та лікарських препаратів). За допомогою квантово-механічного методу теорії функціоналу густини встановлено механізми впливу координаційних зв'язків, водневих та стекінг-взаємодій на структурну стабільність і коливальні характеристики таких комплексів. Виявлено фундаментальну роль точкових дефектів поверхні MoS₂ у формуванні ковалентних координаційних зв'язків, що суттєво змінюють електронну структуру та спектральні маркери досліджуваних біомолекул. Отримані дані щодо енергії взаємодії та спектральних проявів є теоретичним підґрунтям для розробки нових біосенсорних пристроїв та систем цільової доставки фармакологічних агентів, а також можуть бути використані для калібрування силових полів у подальших розрахунках методом молекулярної-динаміки.

Державний реєстраційний номер ДіР: 0120U100157, 0123U100628, 0126U001857

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: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. T. Piddubnyi, S. Stepanian, V. Karachevtsev, L. Adamowicz, IR and Raman markers of the interactions between MoS₂ and pyrimidine bases, Low Temperature Physics 50 (2024) 196–203. Q4
- 2. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, Tegafur and lamivudine complexes with MoS₂: Structures, interaction energies, and vibrational spectra, Low Temperature Physics 52 (2026) 568–577. Q3
- 3. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, Defect-induced metal-nucleobase coordination on monolayer MoS₂ and its vibrational fingerprints, Chemical Physics Letters, 2026, in press. Q2
- 4. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, DFT study of vibrational spectra and structure of the pyrimidine base-molybdenum disulfide complexes // in Book of Abstracts of III International Conference «Condensed Matter & Low Temperature Physics 2023» June 5 – 11, 2023, Kharkiv, Ukraine, page 144

- 5. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, Spectral markers of the complexes formed by nucleobases with molybdenum disulfide // in Book of Abstracts of 8-th International Conference «NANOBIOPHYSICS: Fundamental and Applied Aspects» October 3 – 6, 2023, Kharkiv, Ukraine, P6
- 6. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, Influence of structural defects in MoS2 on interaction with biological molecules // in Book of Abstracts of IV International Conference «Condensed Matter & Low Temperature Physics 2024» June 3 – 7, 2024, Kharkiv, Ukraine, 162
- 7. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, Peculiarities of interaction of the sulfur-containing antiviral drug lamivudine with molybdenum disulfide // in Book of Abstracts of V International Conference «Condensed Matter & Low Temperature Physics 2025» June 2 – 6, 2025, Kharkiv, Ukraine, P76
- 8. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, DFT study of tegafur complexes with MoS2: structure, interaction energies and vibrational spectra // in Book of Abstracts of 9-th International Conference «NANOBIOPHYSICS: Fundamental and Applied Aspects» October 6 – 9, 2025, Kharkiv, Ukraine, P27
- 9. T. Piddubnyi, S. Stepanian, L. Adamowicz, Infrared and Raman spectra of the MoS2-adenine and MoS2-guanine complexes: a DFT/M06-2X study // in Book of Abstracts of VI International Conference «Condensed Matter & Low Temperature Physics 2026» June 1 – 5, 2026, Kharkiv, Ukraine, P83

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0120U100157, 0123U100628, 0126U001857

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Степаньян Степан Григорович

2. Stepan Stepanian

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0899-0320

Додаткова інформація: SCOPUS ID 6701466705

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61103, 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. Довбешко Галина Іванівна
2. Halyna I. Dovbeshko

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.07, 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7701-0106

Додаткова інформація: Scopus Author ID 14029629500; Web of Science ResearcherID MGV-2830-2025

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, Київ, 03680, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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: 0000-0001-5131-1544

Додаткова інформація: SCOPUS ID 36641596200; Web of Science ResearcherID J-1274-2014

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пашинська Влада Анатоліївна
2. Vlada Pashynska

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9786-6828

Додаткова інформація: SCOPUS ID 8293676000; Web of Science ResearcherID R-2440-2018

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Песчанський Олексій Валентинович

2. Oleksii V. Peschanskii

Кваліфікація: к. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8453-9104

Додаткова інформація: SCOPUS ID 6602747762; Web of Science ResearcherID: DXD-3981-2022

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

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

Гламазда Олександр Юрійович

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

Гламазда Олександр Юрійович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Калиненко Олександр Миколайович

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна