Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U100917

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-04-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Павленко Олена Леонідівна

2. Pavlenko Olena Leonidivna

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.14

Назва наукової спеціальності: Теплофізика та молекулярна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Шифр наукової спеціальності: 03.00.02

Назва наукової спеціальності: Біофізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 20-04-2021

Спеціальність за освітою: фізика твердого тіла

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.001.08

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 34.17, 29.29

Тема дисертації:

1. Фізичні властивості та механізми міжмолекулярної взаємодії у π-спряжених наносистемах

2. Physical properties and mechanisms of intermolecular interaction in π-conjugated nanosystems

Реферат/анотація:

1. Досліджено спектральні властивості лінійних нейтральних поліметинових скваранових, мероціанінових барвників та їх основ в залежності від будови. Показано, що спектри поглинання скваранів, мероціанінів та їх основ чутливі до типу та локалізації донорних атомів у π-спряженій електронній системі. Проведено квантово-механічний аналіз розподілу заряду в одновимірних π-електронних системах при інжекції 1-5 носіїв зарядів, зокрема при подовженні лінійних та уширенні поліметинових ланцюгів, показано формування солітоноподібних хвиль. Визначено, що при формуванні плівок барвників спектри поглинання зміщуються, що обумовлено агрегацією молекул, яка залежить від розподілу зарядів у їх хромофорі. При взаємодії барвників з фулеренами у плівках та розчинах має місце перебудова електронної структури, яка проявляється у вигляді нових спектральних ефектів. За допомогою квантово-механічних розрахунків показано, що відбувається перенесення заряду від молекул барвників до вуглецевих наноструктур. У випадку

ковалентного зв’язку між лінійними молекулами барвників і фулеренами С60 перерозподіл молекулярних орбіталей комплексів відрізняється від аналогічних комплексів зі стековою взаємодією. Для розчинів протипухлинних препаратів доксорубіцину, а також гемцитабіну, що містять π-спряжені фрагменти з альбуміном спостерігається комплексоутворення як результат під’єднання молекул лікарських препаратів до ароматичних амінокислот. Розраховані константи зв’язування доксорубіцину зменшуються при конюгації молекул із золотими наночатинками при збереженні місць зв’язування. Отримані результати можуть знайти подальше використання при створенні активних елементів для біонанотехнологій та наноелектроніки.

2. The work deals with systematical study of the structure and properties of π-conjugated molecules with different topology without interaction between them, as well as in the complexes based on them and manifestations of the interaction in the condensed state. For linear π-conjugated molecules on the example of neutral polymethine squarain, merocyanine dyes and their bases in low-concentrated solutions, where the interaction between the molecules can be neglected, it is shown that the spectra of these molecules are sensitive to the type and location of heteroatoms, donor-acceptor functional groups in the π-branched electronic system. Quantum-mechanical analysis of charge distribution in one-dimensional π-electron systems at injection of 1-5 charge carriers, in particular for the elongated linear and broadened polymethine chains was performed and the formation of soliton-like waves was shown. The formation of dye-based films leads to shift of the absorption maximum compared to the spectra in solution, due to the aggregation of molecules, which depends on the charge distribution in their chromophores. The broadening of the absorption spectra of dyes in films in comparison with the spectra in solutions is the result of molecular interaction, namely the formation of aggregates of different types. The dye interacting with fullerenes in films and solutions causes the electronic structure rearrangement, which manifests itself in new spectral effects. Ability of fullerene to form stable □□□- complexes with biologically active compounds - derivatives of 1,3-oxazole containing donor -acceptor substituents is considered basing on the spectral and quantum-chemical analysis. For antitumor solutions of doxorubicin as well as gemcitabine containing π-conjugated fragments with albumin, complexation is observed as a result of the addition of drug molecules to aromatic aminoacids. The calculated doxorubicin binding constants decrease under conjugation of the molecules with gold nanoparticles. The obtained results can be applied in the creation of active elements for bionanotechnology and nanoelectronics.

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. Дмитренко Оксана Петрівна

2. Dmytrenko Oksana Petrivna

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

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. Дмитренко Оксана Петрівна

2. Dmytrenko Oksana Petrivna

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

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. Горбик Петро Петрович

2. Gorbyk Petro Petrovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

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. Костерін Сергій Олексійович
2. Kosterin Serhiy Oleksiyovych

Кваліфікація: д. б. н., 03.00.04

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. Чалий Олександр Васильович
2. Chalyi Oleksandr Vasylyovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.14, 03.00.02

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. Білоус Оксана Іванівна
2. Bilous Oksana Ivanivna

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.14

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 — Булавін Леонід Анатолійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні — Булавін Леонід Анатолійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності — Юрченко Т.А.