Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101875

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Марков Вадим Вікторович
2. Markov Vadym Viktorovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 06-05-2021

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, 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 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, 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: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Кількісні залежності «структура речовини – характеристики розподілу» в двофазних та нанодисперсних системах

2. Quantitative «structure of substance – partition characteristics» relationships in two-phase and nanodisperse systems

Реферат/анотація:

1. Проаналізовано існуючі моделі для прогнозування фізико-хімічних властивостей речовин. За допомогою лінійних залежностей вільних енергій сольватації охарактеризовано вплив модифікаторів рухомої фази на утримування аналітів. Зміна коефіцієнтів моделі при варіюванні складу системи добре узгоджується зі зміною її фізико-хімічних властивостей. Визначено найбільш придатні для вирішення даного завдання методи відбору дескрипторів. Генетичний алгоритм і метод повного перебору оптимізовані для відбору дескрипторів і створення мультіпараметріческіх залежностей «структура – утримування –властивість». Побудовано моделі для передбачення розподілу органічних речовин в двофазних і міцелярних системах і моделювання хроматографічного утримування. Дані моделі є універсальними, тобто можуть бути використані для прогнозування поведінки речовин в системах різних типів. Створені моделі не поступаються класичним лінійним залежностям енергій сольватації, проте засновані на неемпіричних

дескрипторах. Запропонована модель валідована шляхом прогнозування розподілу карбонових кислот в системі «вода – міцелярна псевдофаза ДСН», крос-валідацією, моделюванням констант розподілу незалежного набору речовин. Передбачені константи розподілу добре відповідають визначеним експериментально.

2. Existing models to predict physical-chemical properties of substances were analyzed. Linear solvation energy relationships (LSER) were used to describe mobile phase modificator influence on analyte retention. Model coefficient variance on system composition change well corresponds to variance of physical-chemical properties. Methods better fitted to solving of thesis problem were selected. Genetic algorithm and brute force search method were optimized to select a set of molecular descriptors and construct multiparametric «structure – retention – property relationships». The models were built to predict distribution of organic substance in two-phase and micellar systems, as well as to model chromatographic retention. Models are universal, so they are applicable to systems of different types. The proposed models are not inferior to classical linear solvation energy relationships, but based on non-empirical molecular descriptors. The constructed relationships were validated by predicting of the distribution of carboxylic acids in «water – SDS micellar pseudophase» system, cross-validation, prediction of distribution constants for the independent set of substances. The predicted distribution constants are in good agreement with experimentally measured.

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. Бойченко Олександр Павлович

2. Boichenko Oleksandr P.

Кваліфікація: к. 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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мілюкін Михайло Васильович
2. Milyukin Mykhailo V.

Кваліфікація: д.х.н., 21.06.01

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. Артеменко Анатолій Григорович
2. Artemenko Anatolij Grygorovych

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.03

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	Дорошенко Андрій Олегович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Дорошенко Андрій Олегович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.