Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0413U006165

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-11-2013

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Варламова Катерина Володимирівна
2. Varlamova Kateryna Volodymyrivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.03

Назва наукової спеціальності: Органічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 10-10-2013

Спеціальність за освітою: 8.110204

Місце роботи здобувача: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

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): К 41.219.02

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: 65080, Україна, Одеса-80, Люстдорфська дорога, 86

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21

Тема дисертації:

1. Прогнозування властивостей сумішей сполук методами QSAR/QSPR на основі симплексного подавання молекулярної структури

2. Prediction of properties of chemical mixtures by QSAR/QSPR approaches based on simplex representation of molecular structure

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці системи дескрипторів для опису сумішей сполук і застосуванню даної системи для вирішення ряду QSAR/QSPR завдань. Розроблено дескрипторне подавання сумішей сполук з використанням незв'язних симплексів, що включають фрагменти різних компонентів суміші. Отримано співвідношення між структурою фосфорорганічних сполук і інгібуванням ними ацетилхолінестерази. Показана можливість адекватного структурного опису рацематів на 2D рівні за рахунок введення стереохімічних міток хіральних центрів для відповідних незв'язних симплексів. Побудовано адекватні моделі "структура-властивість" для токсичності по відношенню до Daphnia magna натрієвими солями алкоксикарбонілсульфокислот, аліфатичними н-спиртами, фенолами та їх бінарними сумішами. Показано можливість прогнозування комбінованої дії антивірусних препаратів на інгібування реплікації поліовірусу. Були запропоновані перспективні комбінації антивірусних агентів, що включають нові

компоненти. Побудовано модель для прогнозу температур кипіння / конденсації ряду органічних сполук та їх сумішей. Незалежна зовнішня валідація показала, що отримані моделі придатні для прогнозу властивостей нових сумішей досліджуваних 67 сполук одна з одною (більше 2000).

2. The dissertation is devoted to the development of descriptors for chemical mixtures and application of this system to the solution of QSAR/QSPR tasks. Descriptors representatiing the mixtures of chemical compounds which were developed on the base of unbounded simplexes. The relationship between the structure of organophosphates and their inhibition effect on acetylcholinesterase was obtained. The possibility of structural representation of racemates at 2D level by means of incorporation of stereochemical labels for unbounded simplexes was demonstrated. Adequate structure-property models of toxicity towards Daphnia magna of sodium salts of alkoxycarbonylsulfuric acids, aliphatic n-alcohols, phenols, and their mixtures were developed. The possibility of prediction of a combining effect of antiviral preparations on inhibition of replication of poliovirus was shown. Promising combinations of antiviral agents including new drugs absent in the modeling set were proposed. The models for prediction of boiling/dew points of single organic compounds and their mixtures were developed. Independent external validation revealed that the obtained models are suitable for prediction of properties of new mixtures formed by the investigated 67 compounds (more than 2000 new mixtures).

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. Кузьмін Віктор Євгенович

2. Kuzmin Viktor Evhenovych

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03, 02.00.10

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. Оковитий Сергій Іванович

2. Оковитий Сергій Іванович

Кваліфікація: д.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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Танчук Всеволод Юлієвич

2. Танчук Всеволод Юлієвич

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.10

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