Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0404U004278

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-11-2004

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Муратов твген Наілевич
2. Muratov Eugeniy Nailevich

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: 21-10-2004

Спеціальність за освітою: 7.091.601

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): Д 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: 31.21.15

Тема дисертації:

1. Кількісна оцінка впливу структурних факторів на властивості макрогетероциклів що містять нітроген, оксиген та сульфур

2. Quantitative Evaluation of Structural Factors Influence on the Properties of Nitrogen-, Oxygen- and Sulfur-containing Macroheterocycles

Реферат:

1. Об'укт дослідження: феномен прояву макрогетероциклічними молекулами антивіруснох та протимікробнох активностей, каталітичних й адсорбційних властивостей.Мета дослідження: за допомогою іурархічнох системи моделей QSAR/QSPR на основі симплексного представлення молекулярнох структури провести аналіз зв'язку "структура-властивість" для ряду макрогетероциклів (піридинофанів, краун-етерів), хх аналогів і споріднених сполук, що беруть участь у різних гетерофазних процесах (біологічна активність, міжфазний каталіз, адсорбція). Методи дослідження і апаратура: комп'ютерне моделювання. Теоретичні результати та іх новизна: Запропонована нова система формування дескрипторів молекулярнох структури, заснована на симплексному представленні структури сполук. Для генераціх "інтегральних" структурних параметрів уперше використані методи гармонічного аналізу. Одержані нові співвідношення між параметрами структури макрогетероциклічних сполук і хх антивірусною та протимікробною активностями.

Виявлені структурні фрагменти молекул, які впливають на досліджувані властивості. Показано, що використовуваний програмний комплекс "TheorChemSoftware" дозволяу вирішувати різні завдання QSAR/QSPR. Практичні результати і новизна: Добуті в роботі результати визначають шляхи цілеспрямованого створення нових макрогетероциклічних сполук - каталізаторів реакціх міжфазного окислення бензилового спирту хлорохроматом калію, а також перспективних антивірусних і протимікробних препаратів. Для ряду сконструйованих таким чином структур подальші експериментальні дослідження повністю підтвердили результати прогнозу. Предмет та ступінь впровадження: використання результатів роботи в науково-педагогічній практиці ВУЗів і НДі України. Ефективність впровадження забезпечууться використанням більш досконалих методів пошуку зв'язку структура-властивість. Сфера використання: хімія, медицина.

2. Subject of inquiry: phenomenon of development by the macrocyclic molecules antiviral and antimicrobial activity, catalytic and adsorption power. Aim of investigation: development of the structure-activity relationship analysis for the row of macroheterocycles (pyridinophanes, crown ethers), their analogues and relative compounds, participating in different interphase processes (biological activity, interphase catalysis, adsorption) using the hierarchic system of QSAR/QSPR models on the basis of simplex representation of molecular structure. Methods of investigation and instruments: computer-based modeling. Theoretical results and novelty: a new system of molecular structure descriptors forming based on the simplex representation of molecular structure has been offered. For the generation of "integral" structural parameters the methods of harmonic analysis has been used for the first time. The structural fragments of molecules, most affecting the studied properties, have been exposed. It was shown, thatthe usage of program complex "TheorChem Software" allows solving different QSAR/QSPR tasks. Practical results and novelty: The obtained in the given work results are determine the ways of purposeful creation of new macroheterocyclic compounds - catalysts of reaction of benzyl alcohol interphase oxidation by potassium chlorochromate, and also perspective antiviral and antimicrobial preparations. Subsequent experimental researches fully verify the results of prognosis. Subject and degree of introduction: application of present work results in education practice in universities of Ukraine. Efficiency of introduction caused due to the more perfect methods of searching structure-property relationship. Field of application: chemistry and medicine.

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 В.Е.

2. Kuz'min V.E.

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ганін Е.В.
2. Ганін Е.В.

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. Аліханіді С.Е.
2. Аліханіді С.Е.

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