Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0413U007042

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2013

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кузнецова Тетяна Юріївна
2. Kuznetsova Tatiana Yurievna

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: 05-12-2013

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Полтавський національний технічний університет імені Юрія Кондратюка

Код за ЄДРПОУ: 02071100

Місцезнаходження: 36011, м. Полтава, Першотравневий проспект, 24

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 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О.О. Чуйка НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул.Генерала Наумова, 17, м. Київ, Київська обл., 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Полтавський національний технічний університет імені Юрія Кондратюка

Код за ЄДРПОУ: 02071100

Місцезнаходження: 36011, м. Полтава, Першотравневий проспект, 24

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. Антирадикальна активність мелатоніну і глутатіону за результатами квантовохімічних та електрохімічних досліджень

2. Antiradical activity of melatonin and glutathione on the results of quantum chemical and electrochemical studies

Реферат/анотація:

1. Проведено моделювання порівняльної антирадикальної активності антиоксидантів на прикладі взаємодії мелатоніну та глутатіону із гідроксил-радикалом і супероксид-аніон-радикалом на основі результатів квантовохімічних розрахунків та електрохімічних вимірювань, що дозволяє обґрунтовувати мікроскопічний механізм антирадикальної активності цих молекул шляхом запропонованої схеми перерозподілу електронної густини в молекулах мелатоніну та глутатіону під впливом вільних радикалів й дає можливість прогнозувати й встановлювати найбільш вірогідні активні центри розглядуваних антиоксидантів, які визначають їх антирадикальну активність. Запропонована схема перерозподілу електронної густини в молекулах мелатоніну і глутатіону під впливом вільних радикалів. Доведено, що збільшення кількості вільних радикалів по відношенню до молекул мелатоніну і глутатіону принципово не змінює виявлений механізм перерозподілу електронної густини і вказує на інваріантність перебігу таких реакцій щодо як концентрації

вільних радикалів, так і до врахування впливу сольватаційних ефектів. За результатами квантовохімічних розрахунків обґрунтовано більш виражену антирадикальну активність глутатіону у порівнянні із мелатоніном по відношенню до гідроксил-радикала та супероксид-аніон-радикала. Встановлена кореляція зміни макроскопічних характеристик процесу електровідновлення (потенціал відновлення) з результатами отриманими на нанорівні (перерозподіл електронної густини, порядки зв'язків, енергетичні характеристики при взаємодії молекул антиоксидантів із вільними радикалами). Доведено перспективність використання квантовохімічних розрахунків в поєднанні з електрохімічними дослідженням для обґрунтування та встановлення особливостей та відмінностей антирадикальних активностей мелатоніну і глутатіону та інших антиоксидантів при взаємодії з супероксид-аніон-радикалом і гідроксил-радикалом з метою прогнозування шляхів створення нових лікарських препаратів.

2. The antioxidant comparative activity modeling was performed on the basis of the interactions of melatonin hormone (MLT) and enzyme glutathione (GSH) with hydroxyl-radicals and superoxide-anion-radicals, using results of quantum chemical calculations and electrochemical measurements, that allowed to prove the microscopic mechanism of the anti-radical activity of these molecules by the offered scheme of the changes of inter-atomic distances between the "outer" atoms of MLT and GSH antioxidants upon the influence of *OH and *OO- radicals, and gave the opportunity to predict a set the most possible active centers of the discussed antioxidants that substantiate their antioxidant activity.

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. Соловйов Веніамін Васильович

2. Solovjov Veniamin Vasilevych

Кваліфікація: д.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. Омельчук Анатолій Опанасович

2. Омельчук Анатолій Опанасович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.05

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. Лобанов Віктор Васильович

2. Лобанов Віктор Васильович

Кваліфікація: д.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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

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