Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0404U004279

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. Огніченко Людмила Миколаївна
2. Ognichenko Lyudmila Nikolaevna

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: 20-10-2004

Спеціальність за освітою: 7.070.301

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. Концепція інформаційного поля молекул та її застосування для вирішення завдань структура-властивість органічних сполук

2. A concept of the molecular informational field and its applications for the solution of structure- property tasks for organic compounds

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження: концепція інформаційного поля молекул. Мета дослідження: розробка концепції інформаційного поля молекул, аналіз її ефективності та прикладних можливостей для вирішення завдань органічної хімії. Методи дослідження і апаратура: комп'ютерне моделювання. Теоретичні результати та їх новизна: уперше запропоновано концепцію інформаційного поля молекул, суть якої полягає в описі та аналізі структурування молекулою навколишнього простору. Розроблено систему нових структурних дескрипторів - характеристик інформа ційних полів, що закономірно змінюються при система тичному варіюванні молекулярної структури. Показано можливість побудови зважених інформаційних полів, де в якості вагових характеристик використовуваються різні властивості атомів молекул. Розроблено методику розрахунку еквіінформаційних оболонок, що відображають форму молекул. Розроблено модель інформаційного поля хіраль ності молекул, яка відображає здатність хіральної молекули дисиметризувати

навколишній простір. Запропоновано способи оцінки комплементарності інформаційних полів при аналізі взаємодії гість-хазяїн. Створено процедуру кількісної оцінки ізостеризму для різних біологічно активних речовин. Розроблено модель векторного інформаційного поля потенційних водневих зв'язків. Практичні результати і новизна: виявлено, що інформаційний вплив ?-амінокислот на навколишній простір корелює з їх незамінністю, що відображає інформаційну роль ?-амінокислот на ранніх стадіях абіогенезу. Показано, що важливим чинником, що впливає на спорідненість стероїдів до кортикостероїд- та тестостерон-зв'язуючих глобулінів, є можливе утворення міжмолекулярних водневих зв'язків оксигеновмісних фрагментів; найбільш адекватні моделі, що описують взаємодію 1,4-бенздіазепін - 2-онів з бенздіазепіновим сайтом в сімействі ГАМКА рецепторів, побудовано на основі параметрів як скалярних, так і векторних інформаційних полів, що враховують розподіл маси та рефракцій атомів; інтенсивність люмінесценції ?-дикетонатних комплексів лантаноїдів може бути оцінена на основі характеристик потенціалу, градієнта та дивергенції відповідних скалярних інформаційних полів, зважених за ліпофільністю. Виявлено, що тільки для ахіральних молекул позитивні ("праві") та негативні ("ліві") області потен ціалу інформаційного поля хіральності повністю компенсують одна одну. Для енантіомерів молекул з вісьовою симетрією потенціал інформаційного поля хіральності має постійний знак: (+) для "правих" та (-) для "лівих" стереоізомерів. Предмет та ступінь впровадження: використання результатів роботи в науково- педагогічній практиці ВУЗів і НДІ України. Ефективність впровадження забезпечується використанням більш досконалих методів пошуку зв'язку структура - властивість. Сфера використання: хімія, медицина.

2. Subject of investigation: is the concept of molecular informational field. The aim of investigation: is development of the concept of molecular informational field, analysis its effective and applications for solution of tasks of organic chemistry. Methods of investigation and appliances: computer-based modelling. Theoretical results and their novelty: the new concept on the molecular informational field, which is based on description and analysis of the space structuring around molecules, was developed. There are different weighting schemes for generating scalar and vector informational fields suggested. The technique of account of equiinformational shell reflecting the form of molecules was developed. The chirality informational field describing the ability of chiral molecules to dissymmetrize surrounding space was developed. It was offered the "host -guest" complementary binding evaluating schemes by the complementary informational fields. The new approaches for the quantitative estimation of molecular similarity/ dissimilarity were developed. The model of vector informational field of potential H-bonds was developed. Practical results and novelty: It is revealed, that ? -aminoacid informational influence on surrounding space correlates with their indispensability, this fact reflects an informational role ? -aminoacids at early stages of abiogenesis. Is shown, that the important factor, influencing on steroid affinity to corticosteroid- and testosterone binding globulins, is the possible formation of intermolecular H-bonds; the most adequate models describing interaction 1,4-benzodiazepin-2- ones and GABAA receptors are constructed on the basis of parameters both scalar, and vector informational fields of distribution of atom weights and refractions; lanthanide (III) ?- diketonates luminescence intensity can be appreciated on the basis of the characteristics of potential, gradient and divergence of scalar informational fields weighed by lipophilicity. It is revealed, that the positive ("right")and negative ("left") areas of potential of an chirality informational field completely compensate each other only for achiral molecules. The potential of an chirality informational field has a constant mark for enantiomeres with axial symmetry: (+) for "right" and (-) for "left" stereoisomeres. Subject and rate of introducing: use of work results in scientific-educative practice. Effectiveness of introducing: ensures by application of more perfect methods of searching structure - property relationship. Field of application: chemistry, 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.Є.
2. Kuz'min V.Ye.

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. Камалов Г.Л.
2. Камалов Г.Л.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03, 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 В.Ю.

2. Танчук В.Ю.

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.