Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0401U000339

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2001

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Аліханіді Сократіс Едуардович
2. Alikhanidi Sokratis Eduardovych

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: 18-01-2001

Спеціальність за освітою: 7.07.03.01

Місце роботи здобувача: ВАТ "ОДРІ"

Код за ЄДРПОУ: 25414435

Місцезнаходження: вул. Сонячна, 10, м. Одеса, 65009

Форма власності:

Сфера управління:

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: Одеський державний університет ім. І.І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: 65026, м. Одеса, вул. Дворянська, 2

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.21.18

Тема дисертації:

1. Кількісний аналіз асиметрії та хіральності молекул для вирішення задач "структура -- властивості органічних сполук"

2. Quantitative analysis of asymmetry and chirality of molecules for solving of "structure - properties of organic compounds" tasks

Реферат:

1. Об'єкт дослідження: асиметрія та хіральність молекул, индукування холестеричної мезофази, хіральні макроцикли, стереоселективність асиметричних реакцій, опис біологічної активності. Мета дослідження: розвиток теоретичних методів кількісної оцінки параметрів асиметрії і хіральності молекул та аналіз ефективності використання цих параметрів для дослідження зв'язку між структурою і властивостями органічних сполук. Методи дослідження і апаратура: комп'ютерне моделювання. Теоретичні результати та їх новизна: проведено модифікацію методу Folding-Unfolding, розроблено метод функції асиметрії, реалізовано модель Китайгородського та Гілата. Практичні результати: вдалося вирішити наступні задачі "структура--властивість": а) аналіз закручувальної здатності легуючих домішок, похідних 1,1'-бінафталена, геліценів; б) прогноз ефективності легуючих домішок, похідних ментону; в) аналіз стереоселективності приєднання цинкорганічних сполук до бензальдегіду за допомогою хіральних каталізаторів; г) аналіз комплементарності

взаємодії "ліганд--рецептор". Крім того, здійснено стереодизайн похідних калікс[4]арену з найбільш хіральною порожниною. 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--властивості. Сфера використання: хімія та медицина.

2. Object of investigation: asymmetry and chirality of molecules, cholesteric mesophase inducing, enanthioselective macrocyclic complexant, enanthioselective asymmetric reactions, fitting of biological activity.Aim of investigation: the development of theoretical methods for quantitative evaluation of asymmetry and chirality parameters of molecules, and analysis of relationships between structure and properties of molecules. Methods of investigation and instruments: computer-based modeling. Theoretical results and novelty: the known Folding-UnFolding method was modificated, Asymmetry Function method was developed, the model of Kitaigorodskii-Gilat was realized. Practical results and novelty: the following tasks were solved: a) the analysis of helical twisting power of dopants being derivatives of 1,1'-binaphtalene, helicenes; b) the prediction of helical twisting power of some menthone derivatives; c) the analysis of stereoselectivity of reaction of organozinc addition to benzaldehyde using chiral catalysts; d) complementarity analysis of "ligand-receptor" interaction. Also the stereodesign of most chiral calyx[4]arenas derivatives was carried out. Subject and degree of introduction: application of results of dissertation in institutes and universities of Ukraine.Efficiency of introduction is caused by use of the advenced instruments to search for structure-properties 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 Віктор Євгенович
2. Kuz'min Viktor Yevgenovych

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. Шишкін Олег Валерійович
2. Шишкін Олег Валерійович

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. Стельмах Ігор Борисович
2. Стельмах Ігор Борисович

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 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.