Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0412U001628

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-03-2012

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ракіпов Ільдар Марсович
2. Rakipov Ildar Marsovich

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: 24-02-2012

Спеціальність за освітою: 7.070301

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. Фрагментація RGD-пептидоміметиків, які містять залишок b-аланіну, в умовах мас-спектрометрії з бомбардуванням швидкими атомами

2. Fragmentation of RGD-peptidomimetics, containing b-alanine residue, in fast atom bombardment mass spectrometry

Реферат:

1. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.03 - органічна хімія. Фізико-хімічний інститут ім. О.В. Богатського НАН України, Одеса, 2012. Дисертація присвячена вивченню структури RGD-пептидоміметиків, які містять фрагмент b-аланіну, методом мас-спектрометрії з бомбардуванням швидкими атомами (МС БША). Систематичне вивчення мас-спектрів БША позитивних та негативних іонів дозволило встановити основні напрямки фрагментації досліджуваних сполук та їх аналітичні ознаки. Основні напрямки розпаду протонованих молекул RGD-пептидоміметиків, які містять в своїй структурі гетероциклічні фрагменти, пов'язані з дисоціацією амідних або сусідніх з ними зв'язків, що залежить від місцеположення локалізації заряду та стійкості утворених продуктів, обумовленої їх структурою і підтверджується квантово-хімічними розрахунками. У випадку гідрохлоридів досліджуваних сполук, які містять в b-положенні аланіну замісники R=H, Ph, Hal-Ph фрагментація протонованих молекул

[M+H]+ приводить до утворення іонів b, y, y1 и b1. Введення алкоксифенільних замісників в b-положення залишку аланіну сприяє появі нових напрямків розпаду, які приводять до утворення іонів c і z. В спектрах іонів-продуктів протонованих молекул всіх досліджуваних сполук, які містять в b-положенні аланіну алкоксифенільні замісники, крім основних напрямків розпаду спостерігається додатковий напрямок фрагментації, який приводить до утворення перегрупованих іонів [b1+OH+H]+. Перебіг цього перегрупування залежить не тільки від характеру замісника, але і від структури центрального фрагмента пептидоміметика. Для похідних ізофталевої кислоти це перегрупування є домінуючим (крім сполуки з R=H), тоді як інші напрямки розпаду не реалізуються. У випадку сполук, які містять трет-бутоксикарбонільну групу, доказаний факт перебігу фрагментації індукованої віддаленим зарядом.

2. Thesis for candidate degree in chemistry, specialty 02.00.03 - organic chemistry. - A.V. Bogatsky Physico-Chemical Institute of NAS of Ukraine. Odessa, 2012.Thesis is dedicated to the study of RGD-peptidomimetics structure which contain b-alanine fragment by fast atom bombardment mass spectrometry (FAB MS). Systematic study FAB mass spectra of positive and negative ions are permitted to determine main fragmentation pathways investigated compounds and its analytical features. The relative probability of realization one or another fragmentation pathway is dependent on the charge location and stability of products formation, due to the structure and confirmed by quantum-chemical calculations. In case of hydrochlorides of investigated compounds which contain R=H, Ph, Hal-Ph in b-position of b-alanine, fragmentation of protonated [M+H]+ molecules leads to the formation b, y, y1 и b1 ions. Introduction of Alk-O-Ph substituent into the b-position of b-alanine promotes the appearance of new fragmentation pathways leads to formation c and z ions. Investigation of protonated RGD-peptidomimetics molecules by the tandem MS methods show, that formation of rearrangement [b1+OH+H]+ ions is depends not only on the substituent in b-position of b-alanine, but also on the central fragment of peptidomimetic structures. For isophthalic acid derivatives that rearrangement is dominated (except compound R=H), while other fragmentation pathways is not realized. Metastable product ions spectra of alkali metal-cationized molecules are characterized the intensive peak [b1+OH+Cat]+ ions while other characteristic ions for protonated molecules are absent. In case of compounds, which consist tert-Butyl carbamate group charge-remote fragmentation was dedicated.

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. Мазепа Олександр Володимирович

2. Mazepa Alexandr Vladimirovich

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. Комаров Ігор Володимирович
2. Комаров Ігор Володимирович

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. Павловський Віктор Іванович
2. Павловський Віктор Іванович

Кваліфікація: к.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

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.