Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0417U000470

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-03-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Година Діана Миколаївна
2. Hodyna Diana Mykolaivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.10

Назва наукової спеціальності: Біоорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 03-03-2017

Спеціальність за освітою: 0401

Місце роботи здобувача: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: 02660, Україна, м. Київ, вул. Мурманська, 1

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 26.220.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, 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: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: 02660, Україна, м. Київ, вул. Мурманська, 1

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.23

Тема дисертації:

1. QSAR прогнозування та оцінка антимікробної активності імідазолієвих солей
2. QSAR prediction and evaluation of antimicrobial activity of imidazolium salts

Реферат/анотація:

1. Ряд імідазолієвих солей як перспективні біоциди з широким спектром антимікробної дії. Створення прогнозуючих QSAR моделей антимікробної активності імідазолієвих солей як ефективних біоцидів широкого спектру дії та експериментальне дослідження їх антибактеріальних та протигрибкових властивостей, визначення гострої токсичності досліджених сполук та шляхи її зниження. Розробку QSAR моделей здійснювали за допомогою методів випадкового лісу (WEKA-RF, Random Forest), штучних нейронних мереж (Associative Neural Network, ASNN) та k-найближчих сусідів (k-Nearest Neighbor Method, k-NN) з використанням онлайн платформи OCHEM. Оцінку антимікробної активності досліджуваних сполук визначали диско-дифузійним методом за діаметрами зон затримки росту мікробних культур. Гостру токсичність сполук досліджували на моделі гідробіонта зебрафіш (Danio rerio) за показником LD50. Здійснено прогноз антимікробних властивостей імідазолієвих солей проти бактеріальних культур B.subtilis, Ps.aeruginosa, E.coli, S.aureus та гриба C.albicans. На основі QSAR прогнозування та експериментальних

досліджень встановлено взаємозв'язок між рівнем антимікробної активності досліджених сполук та особливостями їх хімічної будови. Вперше визначено гостру токсичність імідазолієвих солей та шляхи її зниження за рахунок комплексоутворення досліджених сполук із циклічним олігосахаридом b-циклодекстрином. Результати роботи впроваджено у навчальний процес та науково-дослідну роботу кафедри біомедичної інженерії НТУУ "КПІ". Сфера використання - біоорганічна хімія.

2. A series of imidazolium salts as promising biocides with a broad-spectrum of antimicrobial activity. The creation of predictive QSAR models of imidazolium salts antimicrobial activity as an effective broad-spectrum biocide, the experimental study of their antibacterial and antifungal properties, the determination of acute toxicity of the studied compounds and the effective ways to reduce it. The construction of QSAR models was performed using the methods of Random Forest (WEKA-RF), Associative Neural Network (ASNN) and k-Nearest neighbors (k-NN) due to OCHEM online platform. The antimicrobial activity of the studied compounds was evaluated by disk diffusion method in order to measure the diameters of the inhibition zones of microbial growth. The acute toxicity tests of the compounds towards the aquatic organism zebrafish (Danio rerio) were evaluated by the index of the lethal dose, the LD50. The prediction of antimicrobial properties of imidazolium salts against bacterial cultures (B.subtilis, Ps.aeruginosa, E.coli, S.aureus) and the fungal culture (C.albicans) is presented. Based on QSAR prediction and experimental studies the correlation between the level of antimicrobial activity of the studied imidazolium salts and their chemical structural characteristics was established. The acute toxicity of imidazolium salts and the way to reduce it by complex formation of studied compounds with a cyclic oligosaccharide b-cyclodextrin was for the first time identified. The results of this work are implemented in the educational process and scientific research work of the Department of Biomedical Engineering of NTUU "KPI". The sphere of application is bioorganic chemistry.

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. Метелиця Лариса Олексіївна

2. Metelytsia Larisa Alekseevna

Кваліфікація: к.б.н., 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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бражко Олександр Анатолійович
2. Бражко Олександр Анатолійович

Кваліфікація: д.б.н., 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Артеменко Анатолій Григорович
2. Артеменко Анатолій Григорович

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