Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003434

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-07-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дикун Олексій Михайлович
2. Dykun Oleksii M.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 02-07-2019

Спеціальність за освітою: хімія

Місце роботи здобувача: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії імені Л.М. Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420734

Місцезнаходження: Харківське шоссе 50, м. Київ, Київ, 02160, Україна

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 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізико-органічної хімії і вуглехімії імені Л.М. Литвиненка

Код за ЄДРПОУ: 05420734

Місцезнаходження: Харківське шоссе 50, м. Київ, Київ, 02160, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Будова і фізико-хімічні властивості основ Шиффа і гідразонів госиполу

2. Structure and physico-chemical properties of gossypol Schiff bases and hydrazones

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена дослідженню будови і антирадикальних властивостей основ Шиффа і гідразонів госиполу. Синтезовано дев'ять імінопохідних госиполу (три з яких отримані вперше): сім основ Шиффа і два гідразона. Методами молекулярної спектроскопії (ІЧ, УФ, ЯМР) і квантової хімії досліджено будову і таутомерію цих сполук. Повне віднесення всіх сигналів (13С ЯМР) і смуг коливальних і електронних спектрів поглинання виконане за допомогою DFT і TD-DFT розрахунків. Антирадикальні властивості імінопохідних госиполу оцінені в реакції з 2,2'-дифеніл-1-пікрилгідразилом (ДФПГ) і катіон-радикалом 2,2'-азино-біс-(3-етилбензтіазолін-6-сульфокислоти) (АБТС) в етанолі за допомогою стехіометричних коефіцієнтів реакції, EC50, VCEAC і TEAC. Отримані константи швидкості реакції імінпопохідних госиполу з ДФПГ на повільній стадії. За допомогою квантово-хімічних розрахунків встановлено найбільш реакційно здатні O–H групи досліджених імінопохідних. Показано, що всі досліджені сполуки є ефективними антирадикальними агентами по відношенню до ДФПГ і катіон-радикала АБТС. Проведено дослідження реакційної здатності

основ Шиффа госиполу по відношенню до ДФПГ в присутності хлоридної кислоти. Показано існування кореляції між величинами хімічних зсувів протонів N–H груп основ Шиффа госиполу і константами швидкості реакції, що дозволяє робити прогноз реакційної здатності основ Шиффа госиполу по відношенню до вільних радикалів. Встановлено, що іміпохідні госиполу виявляють цитостатичну активність і є потенційними об'єктами для подальших біологічних досліджень.

2. The thesis is devoted to investigation of the structure and radical scavenging properties of gossypol Schiff bases and the hydrazones. Seven gossypol Schiff bases and two hydrazones were synthesized (three of which are new compounds). The structures and tautomeric equilibria of synthesized gossypol imine derivatives were studied by NMR, FT-IR, UV-Vis spectroscopy and quantum chemistry methods. Complete assignment of all signals (13C NMR) and bands in vibrational and electronic absorption spectra were established using DFT and TD-DFT calculations. Free radical scavenging activity of synthesized compounds was evaluated by total stoichiometries, EC50, VCEAC and TEAC assays using the free DPPH (2,2'-diphenyl-1-picrylhydrazyl) radical and ABTS (2,2'-azino-bis(3-ethylbenzothiazoline-6-sulphonic acid)) radical cation in ethanol. The rate constants for the reaction of gossypol imine derivatives with DPPH in the slow step were obtained. The most reactive O-H groups of the studied compounds were established using quantum chemical calculations. It was shown that all the studied compounds are effective radical scavenging agents toward DPPH radical and ABTS radical cation. Investigation of the reactivity of gossypol Schiff bases toward DPPH in the presence of chloride acid were carried out. The existence of correlation between chemical shifts of protons of N-H groups and reaction rate constants was shown. This allows predicting the reactivity of gossypol Schiff bases toward free radicals. It was found that gosypol imine derivatives inhibit cell proliferation and have cytostatic 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. Редько Андрій Миколайович
2. Redko Andrii M.

Кваліфікація: к. 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. Манк Валерій Веніамінович
2. Mank Valery V.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шендрик Олександр Миколайович
2. Shendrik Alexandr M.

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