Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0409U000428

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-02-2009

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Драпак Ірина Володимирівна
2. Drapak Iryna Volodymyrivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 15.00.02

Назва наукової спеціальності: Фармацевтична хімія та фармакогнозія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 15-01-2009

Спеціальність за освітою: 7.11.201 фармація

Місце роботи здобувача: Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код за ЄДРПОУ: 02010793

Місцезнаходження: 79010, м. Львів, вул. Пекарська 69

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 350062

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: Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код за ЄДРПОУ: 02010793

Місцезнаходження: 79010, м. Львів, вул. Пекарська 69

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 76.31.33

Тема дисертації:

1. Вивчення зв'язку "структура - дія" протитуберкульозних засобів - похідних альфа-, бета-, гама-піридинкарбонових кислот методами квантової хімії

2. Studing of the structure-activity relationship for antituberculosis drugs, the derivatives of alfa-, beta-, gama - pyridinecarboxylic acids by quantum chemistry methods.

Реферат/анотація:

1. Об'єкт - похідні альфа-, бета-, гама-піридинкарбонових кислот; мета - виявлення загальних закономірностей залежності активності протитуберкульозних засобів - похідних альфа-, бета-, гама-піридинкарбонових кислот від електронно-просторової будови їх молекул, а також визначення на основі виявлених закономірностей подальших тенденцій цілеспрямованого синтезу нових протитуберкульозних сполук; методи - напівемпіричні квантово-хімічні методи, QSAR-аналіз, докінг, органічний синтез, спектральні методи аналізу (ПМР-спектроскопія), елементний аналіз, високоефективна рідинна хроматографія, фармакологічний скринінг; новизна - розроблено загальну методологію та схему аналізу залежності протитуберкульозної активності похідних альфа-, бета-, гама-піридинкарбонових кислот від електронно-просторової структури їх молекул, проведено докінгові дослідження та встановлено

особливості взаємозв'язку "структура - дія" для цілеспрямованого пошуку сполук з протитуберкульозною активністю; результати - на основі віртуального скринінгу здійснено цілеспрямований синтез нових протитуберкульозних сполук - похідних альфа-, бета, гама-піридинкарбонових кислот з максимальною прогнозованою активністю, досліджено ліпофільність, протитуберкульозну активність та гостру токсичність. Виділено найактивніші та малотоксичні речовини для проведення поглиблених фармакологічних досліджень; впроваджено в науковий процес Національного фармацевтичного університету, Запорізького державного медичного університету, Національного університету "Львівська політехніка", Львівського національного медичного університету імені Данила Галицького; галузь - фармація.

2. Object - derivatives of alfa-, beta-,gamma-pyridinecarboxylic acids; aim - finding out the general regularities of structure - antituberculosis activity relationship of alfa-, beta-, gamma-pyridinecarboxylic acids derivatives from the electronic-configuration structure of their molecules, also defining the main trends of the purposeful synthesis on new compounds with antituberculosis effect; methods - semi-empirical quantum chemical methods, QSAR-analysis, docking, organic synthesis, spectral analysis methods (PMR-spectroscopia), elemental analysis, high-performance liquid chromatography, pharmacological screening; novelty - general methodology and scheme of structure - antituberculosis activity of alfa-, beta-, gamma-pyridinecarboxylic acids derivatives relationship from the electronic-configuration structure of their molecules analysis have been worked out, docking studies have been carried out, peculiarities of structure - activity relationships for the purposeful synthesis on new compounds with antituberculosis effect were determined; the outcomes - the purposeful synthesis of new antituberculosis compounds - alfa-, beta-, gamma-pyridinecarboxylic acids derivatives with the highest predicted activity was carried out as a result of virtual screening; lipophilicity, anti-tuberculosis activity and acute toxicity of the synthesized compounds were identified. The most active and low toxicity compounds were selected for advanced pharmacological studies; there are introduced into scientific process of National Pharmaceutical University, Zaporizhia State Medical University, National University "Lviv Politechnic", Danylo Halytsky Lviv National Medical University; area - pharmacy.

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. Зіменковський Борис Семенович

2. Zimenkovsky Borys Semenovych

Кваліфікація: д.фарм.н., 15.00.02

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. Новіков Володимир Павлович
2. Новіков Володимир Павлович

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. Мазур Іван Антонович
2. Мазур Іван Антонович

Кваліфікація: д.фарм.н., 15.00.02

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 Зіменковський Борис Семенович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Зіменковський Борис Семенович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.