Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0401U000338

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. Артеменко Анатолій Григорович
2. Artemenko Anatolij Grygorovych

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: 19-01-2001

Спеціальність за освітою: 7.070.301

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: 31.21.17

Тема дисертації:

1. Аналіз зв'язку структура - властивість на основі молекулярних граткових моделей

2. Analysis of structure-property relationship on the base of molecular lattice models

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження: стероїди, 1,4-бенздіазепіни, монозаміщені бензоли, бета-дикетонати лантаноїдів, похідні ментону. Мета дослідження: розробка і реалізація підходу, що забезпечує генерацію однорідної системи структурних параметрів, які відображають локальні, інтегральні і польові характеристики молекулярної структури. Методи дослідження і апаратура: комп'ютерне моделювання. Теоретичні результати та їх новизна: розроблено підхід щодо моделювання просторової структури молекул, який забезпечує генерацію однорідної системи структурних параметрів, що відображають локальні, інтегральні та польові характеристики молекулярної структури для ефективного вирішення різноманітних задач "структура- властивості". Практичні результати і новизна: виявлено, що спорідненість стероїдних молекул до кортикостероїд- і тестостерон- зв'язуючого глобуліну в значній мірі зумовлена просторовим розташуванням атомів оксигену; показано, що адекватний опис впливу структури монопохідних бензолу на їх здатність до утворення комплексів з переносом заряду можливий в рамках граткової моделі без проведення квантовохімічних розрахунків; показано, що фторалкільні замісники, які створюють високий потенціал поля

ліпофільності в області хелатних циклів, сприяють збільшенню інтенсивності люмінесценції бета-дикетонатів лантаноїдів (III); виявлено, що використовуючи три групи параметрів, які визначають хіральність, форму молекул, а також їх здатність до міжмолекулярних взаємодій, можливо кількісно оцінити закручувальну здатність похідних ментону в нематичній мезофазі. 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-властивість. Сфера використання: хімія, медицина.

2. Object of investigation: steroids, 1,4-benzodiazepines, monosubstituted benzenes, beta- diketonates of lanthanides, mentone derivatives. Aim of investigation: development and realization of the approach, which provides a generation of homogeneous system of structural parameters, which reflect local, integral and field characteristics of molecular structure. Methods of investigation and instruments: computer-based modeling. Theoretical results and novelty: approach to modeling of a spatial molecular structure is developed and realized, this approach provides a generation of homogeneous system of structural parameters, which reflect local, integral and field characteristics of molecular structure for effective solution of diverse "structure-property" tasks. Practical results and novelty: was detected that a presence of sp2-hybrid oxygen atom bonded with carbon atom C2 of steroid skeleton is an important factor for display of binding affinity of steroids to corticosteroid - binding globulin; was shown tha t on the base of lattice approach without carrying out of quantum-chemical computations we succeeded in building adequate statistic models which reflects the influence of structure of benzene derivatives on their ability to form charge-transfer complexes; shown that the increasing of luminescence intensity of beta- diketonates of lanthanides (III) promote fluoralkyl substituents, which creating the high lipophilicity field potential in chelat cycles region; for mentone derivatives displayed that three group of parameters determining a chirality, molecular shape and also their ability for intermolecular interactions allow quantitatively estimate an effectiveness of this compounds to produce a spiral regulating of nematic methophase. Subject and degree of introduction: application of present work results in education practice in universities of Ukraine. Efficiency of introduction caused due to the more perfect methods of searching structure-property 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 В.Є.

2. Кузьмін В.Є.

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. Ільченко А.Я.
2. Ільченко А.Я.

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. Сидельнікова Т.А.
2. Сидельнікова Т.А.

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 С.А.

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Андронаті С.А.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.