

ДОВІДКА

про творчий внесок

академіка НАН України, доктора хімічних наук, професора

КУЗЬМІНА ВІКТОРА ЄВГЕНОВИЧА в роботу

«Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання, розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів»

Кузьмін Віктор Євгенович впродовж виконання досліджень, які увійшли до роботи, працював на посадах заступника завідувача відділу молекулярної структури, завідувача лабораторії молекулярної структури та хемоінформатики, заступника директора з наукової роботи, завідувача відділу молекулярної структури. На даний час він обіймає посади директора Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України та завідувача відділу медичної хімії та хемоінформатики.

Кузьмін В. Є. - визнаний в Україні лідер в області хемоінформатики, зокрема щодо використання методів навчання машин задля досліджень закономірностей впливу будови органічних сполук на їх різноманітні властивості, зокрема біологічні. Визначним здобутком його наукової роботи є формування та розвиток нового наукового напрямку – «Цілеспрямований пошук і молекулярний дизайн нових речовин та матеріалів з комплексом корисних властивостей, що базується на дескрипторному представленні сполук, яке враховує їх топологію, стереохімію і розподіл властивостей атомів в молекулі».

Творчий внесок В.Є. Кузьміна під час підготовки даної роботи полягає в наступному:

- Формування мети та завдань при дослідженні хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів;

- Створення ієрархічної QSAR технології, унікальна і принципова особливість якої полягає в багатоплановості ієрархічної стратегії, що стосується: моделей опису молекулярної структури сполук, моделей опису атомів в молекулярних симплексах, структурних параметрів, шкал оцінки активності, математичних методів, що використовуються для встановлення зв'язку структура – активність, кінцевої мети вирішення QSAR завдання (прогноз → інтерпретація → оптимізація структури → молекулярний дизайн).

- Використання розробленої технології для аналізу різноманітних видів токсичності сполук, які безпосередньо визначають їх небезпечність, та екологічно важливих властивостей, що створюють умови для розповсюдження забруднювачів в довкіллі та їх проникнення у біологічні об'єкти.

- Виявлення важливих закономірностей впливу структури молекул – полютантів на їхні властивості щодо екологічної небезпеки.

В.Є. Кузьмін приймав участь у проведенні QSAR досліджень пов'язаних з екологічно важливими фізико-хімічними характеристиками забруднювачів, а

також у написанні відповідних наукових статей, розділів у монографіях та підготовки їх до публікації.

Прикладні досягнення роботи – низка комп'ютерних експертних систем для прогнозування основних властивостей речовин, що визначають екологічну небезпеку. Така комплексна система аналізу небезпеки хімічних забруднювачів знаходиться на рівні світових аналогів.

В.Є. Кузьміним за темою роботи представлена 41 публікація, у т.ч. 8 колективних монографій у зарубіжних виданнях, 1 книга за редакцією, 30 статей, з яких 28 статей належать до категорії А (наукові фахові українські видання та закордонні, що проіндексовані міжнародними наукометричними базами Web of Sciences та/або Scopus) та 2 статті до категорії Б (наукові фахові видання України), 2 свідоцтва про реєстрацію авторського права на комп'ютерну програму.

В.Є. Кузьмін — автор понад 300 наукових статей, опублікованих у провідних вітчизняних та міжнародних виданнях, має високий рейтинг цитування: загальна кількість посилань на публікації/ h-index, згідно з базами даних складає відповідно: Web of Science – 3168/ 26; Scopus – 3662/ 26; Google Scholar – 5521/31. Основні результати фундаментальних досліджень В.Є. Кузьміна реалізовано у низці прикладних розробок – створено і впроваджено 12 комп'ютерних експертних систем для прогнозування властивостей органічних сполук. В.Є. Кузьмін підготував 2 докторів і 17 кандидатів наук, учасник 11 науково-дослідних проектів, що фінансувалися міжнародними науковими фондами.

В.Є. Кузьмін нагороджений Відзнаками НАН України „За професійні здобутки”, “За підготовку наукової зміни” та до “100-річчя НАН України”. У 2021 році нагороджений почесною Відзнакою Одеського міського голови «Трудовая слава».

У В.Є. Кузьміна відсутні спільні наукові публікації та/або реалізовані спільні наукові проекти з представниками держави визнаної Верховною Радою України державою-агресором або державою-окупантом, з моменту припинення дії Угоди між Урядом України та Урядом Російської Федерації про науково-технічне співробітництво.

Заступник директора з наукової роботи

Фізико-хімічного інституту
ім. О.В. Богатського НАН України

Претендент на присудження
Національної премії України
імені Бориса Патона

Тетяна КИРИЧЕНКО



Віктор КУЗЬМІН



Україна, 03143, Київ,
вул. Академіка Заболотного, 150
Тел: +380(44) 200-03-56
E-mail: inform@imbg.org.ua;
www.imbg.org.ua
ЄДРПОУ: 05417101

150 Zabolotnoho Str., Kyiv,
03143, Ukraine
Phone: +380(44) 200-03-56
E-mail: inform@imbg.org.ua;
www.imbg.org.ua
EDRPOU code: 05417101

№ 109/265-08
від «01» травня 2024 р.

Довідка про творчий внесок

завідувача відділом молекулярної і квантової біофізики Інституту молекулярної біології і генетики НАН України доктора хімічних наук, професора **Горба Леоніда Григоровича**

до роботи «Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання, розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів», що висувається на здобуття Національної премії України імені Бориса Патона kdpu-nt.gov.ua.

Під час виконання досліджень, залучених до роботи, Л.Г. Горб працював на посадах старшого наукового співробітника, провідного наукового співробітника, завідуючого відділом молекулярної та квантової біофізики Інституту молекулярної біології і генетики НАН України

Творчий внесок Л.Г. Горба під час підготовки даної роботи полягає в наступному:

Сформульовано мету та завдання досліджень, які виконувалися за допомогою квантово-хімічних розрахунків.

Запропонована ідея напівемпіричного методу для аналізу багатоступінчатих органічних реакцій, яку в роботі реалізовано і використано для передбачення хімічних механізмів розкладу забруднювачів навколишнього середовища.

Для розрахунку екологічно важливих фізико-хімічних характеристик забруднювачів навколишнього середовища запропоновано використовувати методи рівноважної термодинаміки, які базуються на квантово-хімічних розрахунках, як, наприклад, метод COSMO-RS.

Л.Г. Горб приймав участь у проведенні частини квантово-хімічних розрахунків пов'язаних як з використанням методу для аналізу багатоступінчатих органічних реакцій, так і у розрахунку екологічно важливих фізико-хімічних характеристик забруднювачів, а також у написанні

відповідних наукових статей, розділів у монографіях та підготовки їх до публікації.

До роботи включено 56 публікацій, з яких п'ять монографій та розділів у колективних монографіях, 49 статей, що проіндексовані міжнародними наукометричними базами даних Scopus та Web of Science. Згідно основних наукометричних баз даних, показники Л.Г.Горба складають:

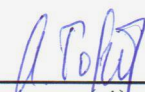
- Scopus – 232 публікації;
загальна кількість посилань – 5503; h-index – 42.
- Web of Science – 261 публікація;
загальна кількість посилань – 5352; h-index – 41.
- Google Scholar – 330 публікацій;
загальна кількість посилань – 6878; h-index – 47.

Л.Г.Горб є лауреатом премії імені С.В.Гершензона НАН України 2008 року.

У подану роботу включено нові наукові результати автора, які не увійшли до раніше премійованих робіт.

У Л.Г.Горба відсутні спільні наукові публікації та спільні наукові проекти з представниками держави визнаної Верховною Радою України державою-агресором або державою-окупантом, з моменту такого визнання.

Автор



(підпис)

Леонід ГОРБ

(власне ім'я та прізвище)

Директор ІМБГ НАН України,
академік НАН України



Михайло ТУКАЛО

(власне ім'я та прізвище)



МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ДНІПРОВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ОЛЕСЯ ГОНЧАРА

просп. Науки, 72, м. Дніпро, 49045, телефон (056) 374-98-01, (056) 374-98-22, факс (056) 374-98-42
E-mail: cdcp@dnu.dp.ua, код ЄДРПОУ 02066747

10.05.2024 № 88-552-164 На № _____ від _____

Довідка про творчий внесок

ректора Дніпровського національного університету імені Олесь Гончара
члена-кореспондента Національної академії наук України, доктора хімічних наук,
професора Оковитого Сергія Івановича
до роботи «Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання,
розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового
призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів», що висувається на
здобуття Національної премії України імені Бориса Патона

Під час виконання досліджень, включених до роботи, С. І. Оковитий працював на посадах завідувача кафедри органічної хімії, проректора з наукової роботи, ректора Дніпровського національного університету імені Олесь Гончара. Працюючи на адміністративних посадах, С. Оковитий продовжує науково-педагогічну роботу на посаді професора кафедри фізичної, органічної і неорганічної хімії за сумісництвом. Основний напрям його наукової роботи – квантово-хімічне моделювання механізмів хімічних реакцій та розрахунок спектральних характеристик молекул.

Особистий внесок у представлену роботу полягає в наступному:

- сформульовано загальну мету досліджень, які виконувалися за допомогою квантово-хімічних розрахунків;
- встановлено механізм розпаду у лужному навколишньому середовищі значної кількості сполук військового призначення, серед яких TNT, DNT, DNAN, RDX, HMX, CL-20;
- для ідентифікації в навколишньому середовищі сполук військового призначення та продуктів їхньої деградації за допомогою квантово-хімічних розрахунків;
- проаналізовано спектральні характеристики і визначені спектральні маркери сполук військового призначення та продуктів їхньої деградації.

С. І. Оковитий брав участь у проведенні частини квантово-хімічних розрахунків, пов'язаних зі встановленням механізмів хімічних реакцій розкладу забруднювачів у навколишньому середовищі, розрахунку спектральних параметрів, а також у написанні відповідних наукових статей, розділів у монографіях та підготовки їх до публікації.

С.І.Оковитий плідно співпрацює з науковцями провідних дослідницьких інститутів та університетів України та США.

С.І.Оковитим До роботи включені **15** публікацій, з яких **1** розділ у колективній монографії та **14** статей, що проіндексовані міжнародними наукометричними базами даних Scopus та/або Web of Science. Згідно основних наукометричних баз даних показники С.І.Оковитого складають: Scopus – 78 публікацій; загальна кількість посилань – 854; h-index – 15. Web of Science Core Collection – 62 публікації; загальна кількість посилань – 714; h-index – 14. Google Scholar – 193 публікації; загальна кількість посилань – 1364; h-index – 19.

У С. І. Оковитого відсутні спільні наукові публікації та/або реалізовані спільні наукові проекти з представниками держави, визнаної Верховною Радою України державою-агресором або державою-окупантом, з моменту припинення дії Угоди між Урядом України та Урядом Російської Федерації про науково-технічне співробітництво.

За дослідження та публікації, що увійшли до роботи, С. І. Оковитий Державні премії не отримував.

Претендент на здобуття
Національної премії України
імені Бориса Патона

В.о. першого проректора

Сергій ОКОВИТИЙ



Валентина СІЛІЧ-БАЛГАБАЄВА

Довідка про творчий внесок

у роботу «Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання, розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів»

Нипорка Олексія Юрійовича, кандидата біологічних наук, доцента, завідувача кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики

Навчально-наукового інституту високих технологій
Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Під час виконання досліджень за тематикою роботи «Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання, розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів» Нипорко Олексій Юрійович працював на посадах провідного інженера, молодшого наукового співробітника, наукового співробітника Інституту клітинної біології і генетичної інженерії НАН України, наукового співробітника ДУ «Інститут харчової біотехнології та геноміки», доцента та завідувача кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики Навчально-наукового інституту високих технологій Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Важливим доробком у наукову роботу стали багаторічні дослідження автором структурних механізмів, що забезпечують підвищену стійкість вищих рослин до різноманітних хімічних чинників – забруднювачів навколишнього середовища, зокрема таких, які широко використовуються як гербіциди. Детальне розуміння мікроструктурних механізмів чутливості/стійкості рослин до хімічних сполук, з одного боку, дає можливість розробки нових засобів захисту рослин, селективних саме до молекулярних мішеней в клітинах рослин-бур'янів, застосування яких дозволить зменшити хімічний тиск на оточуюче середовище і на організм людини, що споживає сільськогосподарську продукцію, а з іншої сторони, суттєво розширює наші уявлення про структурне підґрунтя клітинної адаптивності до хімічних сполук як такої, що дозволяє використовувати ці знання не лише в біології рослин, а в інших галузях хімії, біології і медицини, зокрема, при розробці лікарських препаратів та знешкодження хімічних забруднювачів військового призначення. Автором вперше реконструйовано просторову структуру ряду рослинних білків, що є або клітинними мішенями гербіцидів (α -тубуліни пажитниці жорсткої (*Lolium rigidum* Gaudin), гусячої трави індійської (*Eleusine indica* (L.) Gaertn), 5-енопірувілшикімат-3-фосфат синтаза тридаксу лежачого (*Tridax procumbens* L.), глутамінсинтетаза гусячої трави індійської), або відповідальні за їх детоксикацію (альдокеторедуктази EcAKR4-1 плоскухи селянської (*Echinochloa colona* (L.) Link та LrAKR4C10/LrAKR1 пажитниці жорсткої) або пряме виведення з клітини (ABCC8 транспортер плоскухи селянської). Автор продемонстрував цілком новий структурний механізм стійкості до хімічних сполук на прикладі підвищення стійкості рослин виду *Tridax procumbens* до

гліфосату – одному з найзастосовуваніших у світі гербіцидів. Підвищена стійкість в цьому випадку виникає за рахунок збільшення спорідненості 5-єнопірувілшикімат-3-фосфат синтази до її природного субстрату фосфоєнолпірувату внаслідок амінокислотної заміни Thr-102-Ser, а не зменшення спорідненості до гербіциду, як це відбувається зазвичай, що суттєво розширює наші уявлення про механізми виникнення стійкості до хімічних агентів як такої. Аналогічний структурний механізм також було виявлено автором у випадку підвищення стійкості у гусячої трави до глюфосінату внаслідок заміни Ser-59-Gly в молекулі глутамісинтази.

Вперше було продемонстроване явище спряження процесів окислення/відновлення різних субстратів (зокрема, окислення гліфосату та відновлення коричневого альдегіду) альдокеторедуктазами EcAKR4-1 *Echinochloa colona* та LrAKR4C10/LrAKR1 *Lolium rigidum*, які відбуваються без обміну молекули НАДФ в активному сайті і, таким, чином значно збільшує ефективність роботи цього ензима і оптимізує його детоксикуючі властивості. Вперше ідентифіковано рослинний АВСС транспортер, який локалізується в плазматичній мембрані та продемонстровано його роль підвищенні стійкості до гліфосату у *Echinochloa colona*. Також виявлено, що амінокислотні заміни в позиції 243 молекули α -тубуліну *L. rigidum* (Arg-243 на Met або Lys), які надають резистентність до гербіцидів динітроанілінового ряду, приводять до структурних перебудов сайту зв'язування, зменшенню сприятливих динітроанілін-тубулінових контактів та появи несприятливих взаємодій, результатом чого є значне підвищення вільної енергії взаємодії між α -тубуліном і трифлураліном. Таким чином, залишок Arg-243 у α -тубуліні є одним з визначальних для формування чутливості до трифлураліну та інших динітроанілінів.

Творчий доробок автора, що входить до циклу робіт, складає 23 публікації, серед яких 19 статей у виданнях з імпаکت-фактором, 1 розділ в зарубіжній науковій монографії, та 3 науково-методичні праці.

Повний науковий доробок автора складає більше 80 публікацій, серед яких 3 розділи в зарубіжних фахових монографіях, 44 наукових статті, що індексуються Scopus, а також статті у вітчизняних виданнях, тези доповідей на міжнародних та вітчизняних з'їздах і конференціях та 7 навчально-методичних праць, серед яких 3 навчальних посібники, серед яких 1 – одноосібний.

Загальна кількість посилань на публікації: Web of Science = 302 (h-індекс=10); Scopus = 516 (h-індекс=11); Google Scholar = 807 (h-індекс =13).

Автор не має спільних наукових публікацій та спільних наукових проєктів з представниками держави, визнаної Верховною Радою України державою-агресором або державою-окупантом, з моменту такого визнання.

Претендент

Олексій НИПОРКО

Проректор з наукової роботи
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка



Ганна ТОЛСТАНОВА

ДОВІДКА

про творчий внесок

старшого наукового співробітника, кандидата хімічних наук,
старшого дослідника

АРТЕМЕНКА АНАТОЛІЯ ГРИГОРОВИЧА в роботу

«Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання,
розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового
призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів»

Артеменко Анатолій Григорович впродовж виконання досліджень, які увійшли до роботи, працював на посадах молодшого наукового співробітника, наукового співробітника. На даний час обіймає посаду старшого наукового співробітника відділу медичної хімії та хемоінформатики Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України.

Творчий внесок А.Г. Артеменка під час підготовки даної роботи полягає в наступному:

- Формування та участь у виконанні завдань при дослідженні хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів;

- Участь у створенні та програмної реалізації ієрархічної QSAR технології, унікальна і принципова особливість якої полягає в багатоплановості ієрархічної стратегії, що стосується: моделей опису молекулярної структури сполук, моделей опису атомів в молекулярних симплексах, структурних параметрів, шкал оцінки активності, математичних методів, що використовуються для встановлення зв'язку структура – активність, кінцевої мети вирішення QSAR завдання (прогноз → інтерпретація → оптимізація структури → молекулярний дизайн).

- Використання розробленої технології для аналізу різноманітних видів токсичності сполук, які безпосередньо визначають їх небезпечність, та екологічно важливих властивостей, що створюють умови для розповсюдження забруднювачів в довкіллі та їх проникнення у біологічні об'єкти.

- Виявлення важливих закономірностей впливу структури молекул – поліютантів на їхні властивості щодо екологічної безпеки.

А.Г. Артеменко приймав участь у проведенні QSAR досліджень пов'язаних з екологічно важливими фізико-хімічними характеристиками забруднювачів, а також у написанні відповідних наукових статей, розділів у монографіях та підготовки їх до публікації.

Прикладні досягнення роботи – низка комп'ютерних експертних систем для прогнозування основних властивостей речовин, що визначають

екологічну небезпеку. Така комплексна система аналізу небезпеки хімічних забруднювачів знаходиться на рівні світових аналогів.

А.Г. Артеменком за темою роботи представлено 27 публікацій, серед яких 4 колективні монографії у зарубіжних виданнях, 21 стаття, у т.ч. 20 статей належать до категорії А (наукові фахові українські видання та закордонні, що проіндексовані міжнародними наукометричними базами Web of Sciences та/або Scopus) та 1 стаття до категорії Б (наукові фахові видання України), 2 свідоцтва про реєстрацію авторського права на комп'ютерну програму.

А.Г. Артеменко — автор понад 100 наукових статей, опублікованих у провідних вітчизняних та міжнародних виданнях, має високий рейтинг цитування: загальна кількість посилань на публікації/ h-index, згідно з базами даних складає відповідно:

Web of Science – 1524/20; Scopus – 1498/20; Google Scholar – 2345/23.

Основні результати фундаментальних досліджень А.Г. Артеменка реалізовано у низці прикладних розробок – створено і впроваджено 12 комп'ютерних експертних систем для прогнозування властивостей органічних сполук. Учасник 4 науково-дослідних проектів, що фінансувалися міжнародними науковими фондами.

У Артеменка Анатолія Григоровича відсутні спільні наукові публікації та наукові проекти з представниками держави визнаної Верховною Радою України державою-агресором або державою-окупантом, з моменту такого визнання.

Заступник директора Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України

Тетяна КИРИЧЕНКО

Претендент на присудження Національної премії України імені Бориса Патона

Анатолій АРТЕМЕНКО

ДОВІДКА

про творчий внесок

інженера I категорії, кандидата хімічних наук,
МУРАТОВА ЄВГЕНА НАІЛЕВИЧА в роботу

«Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання, розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів»

Муратов Євген Наїлевич впродовж виконання досліджень, які увійшли до роботи, працював на посадах молодшого наукового співробітника, наукового співробітника, старшого наукового співробітника, інженера I категорії відділу медичної хімії та хемоінформатики Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України.

Творчий внесок Є.Н. Муратова під час підготовки даної роботи полягає в наступному:

- Формування та участь у виконанні завдань при дослідженні хімічних забруднювачів військового призначення, пестицидів, гербіцидів, гепатотоксикантів, сенсibilізаторів шкіри та інших токсикантів;

- Участь у створенні та тестуванні ієрархічної QSAR технології, унікальна і принципова особливість якої полягає в багатоплановості ієрархічної стратегії, що стосується: моделей опису молекулярної структури сполук, моделей опису атомів в молекулярних симплексах, структурних параметрів, шкал оцінки активності, математичних методів, що використовуються для встановлення зв'язку структура – активність, кінцевої мети вирішення QSAR завдання (прогноз → інтерпретація → оптимізація структури → молекулярний дизайн).

- Використання розробленої технології для аналізу різноманітних видів токсичності сполук, які безпосередньо визначають їх небезпечність, та екологічно важливих властивостей, що створюють умови для розповсюдження забруднювачів в довкіллі та їх проникнення у біологічні об'єкти.

- Виявлення важливих закономірностей впливу структури молекул – полютантів на їхні властивості щодо екологічної безпеки.

Є.Н. Муратов приймав участь у проведенні QSAR досліджень пов'язаних з екологічно важливими фізико-хімічними характеристиками забруднювачів, а також у написанні відповідних наукових статей, розділів у монографіях та підготовки їх до публікації.

Прикладні досягнення роботи – низка онлайн-експертних систем для прогнозування основних властивостей речовин, що визначають екологічну безпеку. Така комплексна система аналізу безпеки хімічних забруднювачів знаходиться на рівні світових аналогів.

Є.Н. Муратов плідно співпрацює з науковцями провідних дослідницьких інститутів та університетів США, Канади, Бразилії, Франції, Великобританії. Проходив стажування і працював у:

- Jackson State University (Jackson, MS, USA);
- Laboratory for Molecular Modeling and Drug Design at the Faculty of Pharmacy of the Federal University of Goiás, Brazil;
- Department of Medicinal Chemistry and Natural Products, School of Pharmacy, University of North Carolina, Chapel Hill, NC, USA.

Є.Н. Муратовим за темою роботи представлено 68 публікацій, серед яких 6 колективних монографій та одна книга під його редакцією у зарубіжних виданнях, 61 стаття, що належить до категорії А (наукові фахові українські видання та закордонні, що проіндексовані міжнародними наукометричними базами Web of Sciences та/або Scopus).

Є.Н. Муратов — автор понад 200 наукових статей, опублікованих у провідних вітчизняних та міжнародних виданнях, має високий рейтинг цитування: загальна кількість посилань на публікації/ h-index, згідно з базами даних складає відповідно:

Web of Science – 7994/45; Scopus – 8877/48; Google Scholar – 12334/53.

Основні результати фундаментальних досліджень Є.Н. Муратова реалізовано у низці прикладних розробок – створено і впроваджено низку онлайн експертних систем для оптимізації процесу створення моделей комп'ютерної хімії та прогнозування властивостей органічних сполук. Учасник більше десяти науково-дослідних проєктів, що фінансувалися міжнародними науковими фондами.

У Муратова Євгена Наїлевича відсутні спільні наукові публікації та/або реалізовані спільні наукові проєкти з представниками держави визнаної Верховною Радою України державою-агресором або державою-окупантом, з моменту припинення дії Угоди між Урядом України та Урядом Російської Федерації про науково-технічне співробітництво.

Заступник директора Фізико-хімічного інституту ім. О.В.Богатського НАН України



Тетяна КИРИЧЕНКО

Претендент на присудження Національної премії України імені Бориса Патона

Євген МУРАТОВ

ДОВІДКА

про творчий внесок

старшого наукового співробітника, кандидата хімічних наук,
старшого дослідника

ОГНІЧЕНКО ЛЮДМИЛИ МИКОЛАЇВНИ в роботу

«Розробка і застосування інформаційних технологій для моделювання,
розуміння та прогнозування поведінки хімічних забруднювачів військового
призначення, пестицидів, гербіцидів та інших токсикантів»

Огніченко Людмила Миколаївна впродовж виконання досліджень, які увійшли до роботи, працювала на посадах молодшого наукового співробітника, наукового співробітника. На даний час обіймає посаду старшого наукового співробітника відділу медичної хімії та хемоінформатики Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України.

Творчий внесок Огніченко Л.М. під час підготовки даної роботи полягає в наступному:

- Формування та участь у виконанні завдань при дослідженні хімічних забруднювачів, гербіцидів, пестицидів та інших токсикантів;

- Участь у створенні та тестуванні ієрархічної QSAR технології, що стосується: моделей опису молекулярної структури сполук, моделей опису атомів в молекулярних симплексах, структурних параметрів, шкал оцінки активності, математичних методів, що використовуються для встановлення зв'язку структура – активність, кінцевої мети вирішення QSAR завдання (прогноз → інтерпретація → оптимізація структури → молекулярний дизайн).

- Використання розробленої технології для аналізу різноманітних видів токсичності сполук, які безпосередньо визначають їх небезпечність, та екологічно важливих властивостей, що створюють умови для розповсюдження забруднювачів в довкіллі та їх проникнення у біологічні об'єкти.

- Виявлення важливих закономірностей впливу структури молекул на їхні властивості щодо екологічної безпеки.

Огніченко Л.М. приймала участь у проведенні QSAR досліджень пов'язаних з екологічно важливими фізико-хімічними характеристиками забруднювачів, а також у написанні відповідних розділів у монографіях, наукових статей та підготовці їх до публікації.

До представленої роботи Огніченко Л.М. включені 16 публікацій, з яких 6 закордонних колективних монографій, 10 статей, у т.ч. 8 статей належать до категорії А (наукові фахові українські видання та закордонні, що проіндексовані міжнародними наукометричними базами Web of Sciences та/або Scopus) та 2 статті до категорії Б (наукові фахові видання України).

Огніченко Л.М. - автор 8 колективних монографій, понад 50 наукових статей, опублікованих у провідних вітчизняних та міжнародних виданнях. Учасниця 3 науково-дослідних проектів, що фінансувалися міжнародними науковими фондами.

Згідно основних наукометричних баз даних, показники Огніченко Л.М. складають:

Web of Science - загальна кількість посилань на публікації = 164; h-index = 8;

Scopus - загальна кількість посилань на публікації = 164; h-index = 9;

Google Scholar - загальна кількість посилань на публікації = 320; h-index = 11.

У Огніченко Людмили Миколаївни відсутні спільні наукові публікації та/або реалізовані спільні наукові проекти з представниками держави визнаної Верховною Радою України державою-агресором або державою-окупантом, з моменту припинення дії Угоди між Урядом України та Урядом Російської Федерації про науково-технічне співробітництво.

Заступник директора з наукової роботи Фізико-хімічного інституту ім. О.В. Богатського НАН України



Тетяна КИРИЧЕНКО

Претендент на присудження Національної премії України імені Бориса Патона

Людмила ОГНІЧЕНКО