Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0414U000801

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-04-2014

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Девіняк Олег Теодозійович

2. Devinyak Oleg Teodoziiovych

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: 28-03-2014

Спеціальність за освітою: 7.12020101 фармація

Місце роботи здобувача: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: 88000 Закарпатська обл., м.Ужгород вул.Підгірна.46

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 35.600.02

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код за ЄДРПОУ: 02010793

Місцезнаходження: вул. Пекарська, 69, м. Львів, Львівська обл., 79010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров`я України

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: 76.31.29

Тема дисертації:

1. Спрямований синтез та вивчення кореляції "структура-протимпухлинна активність" похідних 4-тіазолідинонів

2. Directed synthesis and "structure-anticancer activity" correlation study of 4-thiazolidiones derivatives

Реферат/анотація:

1. Об'єкт - 4-тіазолідинони як потенційні протиракові агенти; мета - створення та аналіз математичних моделей кореляції "структура 4-тіазолідинонів - протипухлинна активність", ідентифікація можливих механізмів цієї активності, а також спрямований синтез потенційних протиракових агентів; методи - кластерний аналіз, кореляційний аналіз, аналіз головних компонентів, нейромережеве моделювання, ресемплінг, бутстрап та інші методи Монте-Карло, покрокова регресія, алгоритм Random Forest, Гаусівські процеси, багатовимірні адаптивні регресійні сплайни, конформаційний аналіз, органічний синтез; новизна - запропоновано оригінальний підхід до раціонального дизайну протипухлинних агентів гетероциклічної структури, що базується на методах data mining для виявлення та характеристики механізмів біологічної активності, а також формування раціональних навчальних масивів для подальших досліджень; встановлено,

що 4-тіазолідинони, які проявляють протипухлинну активність, діють за новими, досі досконало не вивченими механізмами, відмінними від механізмів традиційних протипухлинних засобів; створено та досліджено нову модель зв'язку між структурою піразолінзаміщених 4-тіазолідинонів та їх здатністю до інгібування росту клітин недрібноклітинного раку легень; розроблено та випробувано нові нелінійні моделі протипухлинної активності 4-тіазолідинонів; вперше запропоновано структуру ймовірного фармакофора, відповідального за прояв протипухлинної активності похідними 4-тіазолідинону; на основі даних in silico досліджень запропоновано рекомендації до раціонального дизайну потенційних протиракових агентів та здійснено спрямований синтез 14 нових похідних 4-тіазолідинону з суттєвою протипухлинною активністю; впроваджено в науково-дослідний і навчальний процес кафедр НУ "Львівська політехніка", Національного фармацевтичного університету, Запорізького державного медичного університету та ДВНЗ "Ужгородський національний університет", галузь - фармація.

2. Object - 4-thiazolidones as potential anticancer agents; the purpose – development and analysis of mathematical models of "4-thiazolidinones structure – antitumor activity" correlations, identification of possible mechanisms og this activity and directed synthesis of potential anticancer agents; methods – cluster analysis, correlation analysis, principal components analysis, neural networks modeling, resampling, bootstrap and other Monte-Carlo methods, stepwise regression, Random Forest algorithm, Gaussian processes, multivariate adaptive regression splines, conformational analysis, organic synthesis; novelty – original approach for rational design of heterocyclic anticancer agents that is based on data mining methods with the aim of reveal and description of biological activity mechanisms is proposed; the new model for the relationships between pyrazolin-substituted 4-thiazolidinones structure and their capability to inhibit growth of non-small cell lung cancer cells is created and studied; the new non-linear models of 4-thiazolidinones antitumor activity are developed and evaluated; based on the results of in silico studies the recomendations for rational design of potential anticancer agents are proposed and directed synthesis of 14 novel 4-thiazolidinone derivatives showing substantial anticancer activity is carried out; introduced into scientific and educational process of National University "Lviv Politechnic", National Pharmaceutical University, Zaporizhzhya State Medical University and Uzhgorod National 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. Лесик Роман Богданович

2. Lesyk Roman Bogdanovych

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. Коваленко Сергій Іванович
2. Коваленко Сергій Іванович

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Обушак Микола Дмитрович
2. Обушак Микола Дмитрович

Кваліфікація: д.х.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.