Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101359

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Метелиця Лариса Олексіївна
2. Metelytsia Larisa O.

Кваліфікація: к. б. н., 14.03.06

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 02.00.10

Назва наукової спеціальності: Біоорганічна хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 13-05-2021

Спеціальність за освітою: Біологія

Місце роботи здобувача: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, буд. 1, м. Київ, 02094, 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 26.220.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.23

Тема дисертації:

1. In silico та in vitro оцінка антимікробної активності похідних азолів проти резистентних штамів грибкових і бактеріальних культур

2. In silico and in vitro evaluation of azole derivatives antimicrobial activity against resistant strains of fungal and bacterial cultures

Реферат:

1. Синтетичні похідні оксазолу, тіазолу та імідазолу. Дослідження біологічно активних азолів як нових антимікробних агентів проти клінічних флуконазол-резистетних штамів грибів роду Candida та антибіотикорезистентних бактеріальних штамів S. aureus та M. tuberculosis методами in silico та in vitro. QSAR-прогнозування, молекулярний докінг, in vitro методи мікробіологічного тестування. Створено нові QSAR-моделі для прогнозування антимікробної активності 2,4,5-заміщених похідних 1,3-оксазолу, 1,3-заміщених імідазолієвих солей, оксазоловмісних трифенілфосфонієвих солей і тіазоловмісних похідних ізоніазиду із високою прогнозуючою здатністю,які розміщені і є доступними на сервері OCHEM для інших дослідників та можуть бути використані для пошуку, аналізу та прогнозування антикандидозної та

антибактеріальної активності відповідних рядів гетероциклічних сполук проти резистентних клінічних штамів патогенів мікробної природи. Експериментально встановлено здатність N-додецильних похідних імідазолію інгібувати ріст як культури клітин карциноми гортані людини HEP-2, так і ріст грибів роду Candida. Встановлено антимікотичну активність 5-алкілсульфаніл-1,3-оксазол-4-ілтрифенілфосфонієвих солей проти флуконазол-резистентних штамів гриба роду Candida, яка визначається природою замісників у положенні 5 оксазольного кільця. За створеними QSAR-моделями широкого діапазону інгібіторів M. tuberculosis та результатами експериментальних досліджень ідентифіковано ряд нових тіазоловмісних похідних ізоніазиду, активних проти мультирезистентного HRv штаму M. tuberculosis. Методами in silico та in vitro продемонстровано антимікробний потенціал 1,3-діалкілзаміщених похідних імідазолію і 5-алкілтіо-1,3-оксазол-4-ілтрифенілфосфонієвих солей як антибактеріальних агентів проти антибіотикорезистентного клінічного штаму S. aureus. Сфера використання - біоорганічна хімія.

2. Synthetic derivatives of oxazole, thiazole and imidazole. Study of biologically active azoles as novel antimicrobial agents against clinical fluconazole-resistant strains of Candida spp. and antibiotic-resistant bacterial strains S. aureus and M. tuberculosis by in silico and in vitro methods. QSAR prediction, molecular docking, in vitro microbiological testing methods. New QSAR models have been created to predict the antimicrobial activity of 2,4,5-substituted 1,3-oxazole derivatives, 1,3-substituted imidazolium salts, oxazole-containing triphenylphosphonium salts and thiazole-containing isoniazid derivatives with high predictive ability, which are located and available on the OCHEM server and can be used by other scientists to searching, analyzing and predicting of activity of the corresponding series of heterocyclic compounds against resistant clinical strains of microbials. The inhibitory activity of N-dodecyl imidazolium derivatives both against the human laryngeal carcinoma Hep-2 cells culture and against fluconazole-resistant strains of Candida spp. is experimentally established. It has been demonstrated that antimicotic activity of 5-alkylsulfanyl-1,3-oxazol-4-yltriphenylphosphonium salts against Candida spp. fluconazole-resistant strains is determined by the nature of the substituents at position 5 of the oxazole ring. A number of novel thiazole-containing isoniazid derivatives active against the multi-resistant HRv strain M. tuberculosis have been identified using the created QSAR models of a wide range of M. tuberculosis inhibitors and based on the results of experimental studies. The high antimicrobial potential of 1,3-dialkyl substituted imidazolium and 5-alkylthio-1,3-oxazol-4-yltriphenylphosphonium salts as antibacterials agents the antibiotic-resistant clinical strain S. aureus is demonstrated by in silico and in vitro methods. The field of use is bioorganic chemistry.

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. Вовк Андрій Іванович

2. Vovk Andriy Ivanovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.10

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. Вовк Андрій Іванович

2. Vovk Andriy Ivanovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.10

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. Демченко Анатолій Михайлович

2. Demchenko Anatoliy M.

Кваліфікація: д. фармац. 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. Дуган Олексій Мартем'янович
2. Dugan Oleksiy Martemyanovich

Кваліфікація: д. б. н., 03.00.15

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. Кравченко Ірина Анатоліївна
2. Kravchenko Iryna Anatoliivna

Кваліфікація: д.б.н., 14.03.05

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