

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U002937

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-07-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Булгаков Ілля Володимирович

2. Illia Bulhakov

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7031-234X

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 091

Назва наукової спеціальності: Біологія

Галузь / галузі знань: біологія

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Біотехнологія, Молекулярна генетика, Цитологія, клітинна біологія, гістологія

Дата захисту: 05-09-2025

Спеціальність за освітою: Біохімія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 10469

Повне найменування юридичної особи: Державна установа "Інститут харчової біотехнології та геноміки Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 02128514

Місцезнаходження: вул. Байди-Вишневецького, буд. 2-а, Київ, 04123, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Державна установа "Інститут харчової біотехнології та геноміки Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 02128514

Місцезнаходження: вул. Байди-Вишневецького, буд. 2-а, Київ, 04123, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 34.03.23

Тема дисертації:

1. Біоінформатичний аналіз і моделювання комплексу білків, відповідальних за асоціацію фагосоми з мікротрубочками рослинної клітини
2. Bioinformatic analysis and modeling of the protein complex responsible for phagosome-microtubule association in plant cells

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена формуванню уявлення про перебіг та ключові ланки процесу ініціації аутофагії у рослин на прикладі *A.thaliana*; визначенню подібності рослинних білків до більш відомих гомологів або ортологів з клітин тварин та дріжджів; моделюванню низки ATG білків з подальшим передбаченням організації їх у комплекси *in silico*; встановленню особливостей міжбілкових взаємодій із можливим підтвердженням стабільності досліджуваних мультимерних комплексів, що передують збиранню PAS-преаутофагосомної структури на етапі ініціації аутофагії. У роботі визначено тривимірні структури ключових білків, пов'язаних із ініціацією аутофагії в клітинах *A. thaliana*. Методами *in silico* ідентифіковано основні ділянки взаємодії між білками ATG та їхніми платформами (мембранами, мікротрубочками), а також

проаналізовано вплив ацетилювання на ATG8 та тубуліни. Розроблено комп'ютерні моделі та протоколи для подальшого дослідження механізмів посттрансляційних модифікацій. Визначено та валідовані на різних об'єктах, із кореляцією відносно експериментальних даних, оптимальні параметри різних біоінформатичних інструментів та необхідні налаштування для процедур докінгу, симуляцій. Алгоритми штучного інтелекту були використані для перехресної валідації перед проведенням всебічної перевірки молекулярної динаміки. В результаті було створено набір оптимізованих білкових конструкцій для моделювання білкових взаємодій та аналізу молекулярної рухливості за допомогою методів *in silico*.

2. The dissertation is devoted to the formation of an understanding of the process and key stages of autophagy initiation in plants using *A. thaliana* as an example; the identification of similarities between plant proteins and more well-known homologs or orthologs from animal and yeast cells; the modeling of a series of ATG proteins with subsequent prediction of their organization into complexes *in silico*; and the determination of features of protein-protein interactions with possible confirmation of the stability of the studied multimeric complexes that precede the assembly of the PAS-pre-autophagosomal structure during autophagy initiation. Autophagy plays a crucial role in cell development and differentiation, participates in tumor growth suppression, and may be linked to lifespan extension. This work determined the 3D structures of key proteins involved in autophagy initiation in *A. thaliana*. *In silico* methods identified core interaction sites between ATG proteins and their platforms (membranes, microtubules), alongside an analysis of acetylation effects on ATG8 and tubulins. Computational models and protocols were developed for further investigation of PTM mechanisms. Optimal parameters for various bioinformatics tools and docking/simulation procedures were defined and validated across multiple datasets, with correlation to experimental data. AI algorithms were employed for cross-validation before extensive molecular dynamics verification. As a result, a suite of optimized protein constructs was generated for modeling protein interactions and analyzing molecular mobility via *in silico* methods.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Булгаков ІВ, Раєвський ОВ, Блюм ЯБ. Реконструкція моделі мультипротеїнового комплексу, критичного для ліпідизації білка ATG8 під час формування аутофагосоми у рослин. Допов Нац акад наук Укр. 2025;1:68–76. DOI: 10.15407/dopovidi2025.01.068.
- Булгаков ІВ, Раєвський ОВ. Реконструкція геометрії молекул ATG13 та ATG101 у процесі складання комплексу. Фактори експер евол орг. 2024;35:146–50. DOI: 10.7124/FEEO.v35.1676.
- Булгаков ІВ, Раєвський ОВ. Дослідження ATG білків, залучених до формування комплексу ATG1, його взаємодії з білком ATG8 в процесі дозрівання аутофагосом. Фактори експер евол орг. 2023;32:136–41. DOI: 10.7124/FEEO.v32.1550.
- Rayevsky A, Bulgakov E, Sharifi M, Samofalova D, Ozheredov D, Karpov P, Pantano S, Blume Ya. *In silico* induced effect of N- ϵ -lysine acetylation on microtubule stability and subsequent interaction of microtubule-associated proteins. *Cell Biol Int*. 2023;47(9):1547–57. DOI: 10.1002/cbin.12052(Scopus/WoS, Q2)
- 5. Rayevsky A, Bulgakov E, Blume R, Novozhylov D, Stykhylias M, Ozheredov S, et al. Lysine Acetylation of Plant ϵ -Tubulins: Scaling Up the Local Effect to Large System Transformations. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*. 2025 Jun 4. DOI: 10.1002/prot.26846 Epub ahead of print. (Scopus/WoS, Q1)

- 6. Bulgakov E, Rayevsky A, Stykhylias M, Ozheredov S, Spivak S, Blume Ya. Structural flexibility and shape similarity contribute to exclusive functions of certain ATG8 isoforms in the autophagy process. 28 August 2024, PREPRINT (Version 1) available at Research Square DOI: 10.21203/rs.3.rs-4831294/v1
- Rayevsky A, Bulgakov E, Blume Ya. Structural preconditions for the ATG8 functioning and the effect of lipidation and acetylation on its regulatory mechanism. В: 7th Congress of the All-Ukrainian Public Organization «Ukrainian Society of Cell Biology» with international representation; 2024 Sept. 11–13; Lviv, Ukraine. 2024. P. 12.
- Булгаков ІВ, Раєвський ОВ. Біоінформатичний аналіз і моделювання комплексу білків задля ідентифікації сайтів зв'язування ATG8. В: IV конференція молодих учених «Біологія рослин та біотехнологія»; 2025 Трав 16–18; Київ, Україна. К.: 2024. с. 6.

Наукова (науково-технічна) продукція: встановлено особливості міжбілкових взаємодій із можливим підтвердженням стабільності досліджуваних мультимерних комплексів, що передують збиранню pas-преаутофагосомної структури на етапі ініціації аутофагії.

Соціально-економічна спрямованість: визначено тривимірні структури ключових білків, пов'язаних із ініціацією аутофагії в клітинах *A. thaliana*. методами *in silico* ідентифіковано основні ділянки взаємодії між білками atg та їхніми платформами (мембранами, мікротрубочками), а також проаналізовано вплив ацетилювання на atg8 та тубуліни.

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 0120U100937

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Блюм Ярослав Борисович
2. Yaroslav B. Blume

Кваліфікація: д. б. н., професор, академік НАН України, 03.00.01, 03.00.11, 03.00.22

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7078-7548

Додаткова інформація: Academia Europaea: London, London, GB

Повне найменування юридичної особи: Державна установа "Інститут харчової біотехнології та геноміки Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 02128514

Місцезнаходження: вул. Байди-Вишневецького, буд. 2-а, Київ, 04123, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Нипорко Олексій Юрійович
2. Oleksii Y. Nyporko

Кваліфікація: к. б. н., доц., 03.00.11**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-1664-6837**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка**Код за ЄДРПОУ:** 02070944**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна**Форма власності:****Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Шевченко Галина Валеріївна
2. Halyna Shevchenko

Кваліфікація: д. б. н., старший науковий співробітник, 03.00.11**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0001-5826-025X**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Інститут ботаніки ім. М. Г. Холодного Національної академії наук України**Код за ЄДРПОУ:** 05417199**Місцезнаходження:** вул. Терещенківська, буд. 2, Київ, 01601, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Національна академія наук України**Ідентифікатор ROR:****Рецензенти****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Бузіашвілі Анастасія Юріївна
2. Anastasiia Y. Buziashvili

Кваліфікація: к. б. н., 03.00.20**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-8283-5401**Додаткова інформація:**

Повне найменування юридичної особи: Державна установа "Інститут харчової біотехнології та геноміки Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 02128514

Місцезнаходження: вул. Байди-Вишневецького, буд. 2-а, Київ, 04123, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рабоконт Анастасія Миколаївна

2. Anastasiia M. Rabokon

Кваліфікація: к. б. н., 03.00.22

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6249-1824

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державна установа "Інститут харчової біотехнології та геноміки Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 02128514

Місцезнаходження: вул. Байди-Вишневецького, буд. 2-а, Київ, 04123, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Пірко Ярослав Васильович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Пірко Ярослав Васильович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Пастухова Н.Л.

Реєстратор

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна