Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101195

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-04-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Косінська Ганна Павлівна

2. Kosinska Hanna Pavlivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

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: 26-04-2021

Спеціальність за освітою: Біологія

Місце роботи здобувача: Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров`я 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, Київська обл., 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: Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, 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. Структурні фактори молекул, що визначають їх здатність проникнення через гематоенцефалічний бар'єр

2. Structural factors of molecules that determine their ability to penetrate the blood-brain barrier (BBB)

Реферат/анотація:

1. Функціонування гематоенцефалічного бар'єру. QSAR моделі для різних параметрів, що характеризують проникність речовин через ГЕБ, структурні та фізико-хімічні чинники цього процесу. Комп'ютерні програми: MarvinSketch комплексу ChemAxon (ChemAxon Ltd, HyperChem (trial version, Hypercube Inc,). Для обробки даних використовувалися методи «data curation». Стандартизація структур досліджуваних сполук: програми Standardizer (ChemAxon), пошук помилок, дублікатів, структурний аналіз, розрахунок 2D структурних (симплексних) дескрипторів – використовували програмне забезпечення HiTQSAR. QSAR моделі залежностей «структура – проникність через ГЕБ» побудовані методами часткових найменших квадратів (PLS - Partial Least Squares) і випадкового лісу (Random Forest). Сформована база даних, розраховано низку симплексних (фрагментних) дескрипторів, вершини яких диференційовано за різними атомними властивостями. Побудовано низку адекватних QSAR моделей для оцінки параметрів проникнення речовин

через ГЕБ – LogBB, LogPS, LogP0PAMPA-BBB, належність до класу BBB+ / BBB-, субстрат Р-глікопротеїну/ несубстрат. Оцінено стабільність (robustness) побудованих моделей та прогностичну здатність, проаналізовано області застосовності. Проведено фізико-хімічну та структурну інтерпретацію побудованих QSAR моделей. Здійснено порівняльний аналіз впливу структурних та фізико-хімічних факторів для усіх показників проникнення через ГЕБ, оцінено баланс полярних та неполярних чинників. Створено експертну систему для прогнозування різноманітних показників проникнення органічних речовин через ГЕБ. Сфера використання – біоорганічна хімія.

2. Functioning of the blood-brain barrier. QSAR models for different parameters characterizing the permeability of substances through BBB, structural and physicochemical factors of this process. Computer programs: MarvinSketch of the ChemAxon complex (ChemAxon Ltd, http://www.chemaxon.com), HyperChem (trial version, Hypercube Inc, http://www.hyper.com). “Data curation” methods were used for data processing. Standardization of the structures of investigate compounds: Standardizer programs (ChemAxon), search for errors, duplicates, structural analysis, calculation of 2D structural (simplex) descriptors - used HiTQSAR software. QSAR models of "structure - permeability through BBB" are build by methods of partial least squares (PLS - Partial Least Squares) and random forest (Random Forest).A database has been formed, a number of simplex (fragment) descriptors have been calculated, the vertices of which are differentiated according to different atomic properties. A number of adequate QSAR models for estimating the parameters of penetration of substances through BBB - LogBB, LogPS, LogP0PAMPA-BBB , belonging to the class BBB + / BBB-, substrate P-glycoprotein / non-substrate. Robustness and prognostic ability are estimated, areas of applicability domain of models are analyzed. Physico-chemical and structural interpretation of the constructed QSAR models is carried out. A comparative analysis of the influence of structural and physicochemical factors for all parameters of penetration through the BBB, the balance of polar and nonpolar factors. An expert system has been created to predict various penetration parameters through the BBB of organic compounds. Scope - 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. Кузьмін Віктор Євгенович

2. Kuzmin Victor Evgenovich

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Танчук Всеволод Юлійович
2. Tanchuk Vsevolod Yu.

Кваліфікація: к.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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Вовк Андрій Іванович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Вовк Андрій Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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