

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U004461

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-11-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Яковенко Олександр Ярославович
2. Yakovenko Oleksandr Yaroslavovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 03.00.20

Назва наукової спеціальності: Біотехнологія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 28-10-2008

Спеціальність за освітою: 7.070402

Місце роботи здобувача: Інститут молекулярної біології і генетики

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження: 03680, Київ, вул. Заболотного, 150

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 26.237.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут молекулярної біології і генетики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження: вул. Акад. Заболотного, 150, м. Київ, Київська обл., 03143, 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 молекулярної біології і генетики

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження: 03680, Київ, вул. Заболотного, 150

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 62.99.31

Тема дисертації:

1. Розробка технології передбачення спорідненості органічних сполук до молекулярно-біологічних мішеней для рецепторно-орієнтованого скринінгу *in silico*
2. Development of technology of organic molecules to biomolecular targets affinity estimation in field of high-throughput receptor-based *in silico* screening

Реферат:

1. Об'єкт - технологія передбачення афінності низькомолекулярних органічних сполук до молекулярно-біологічних мішеней, включаючи алгоритми їхньої комп'ютерної реалізації; мета - створення на базі нових фізико-хімічних моделей оригінальних методів потокового рецепторно-орієнтованого передбачення афінності органічних сполук до молекулярно-біологічних мішеней з поліпшеними прогностичними можливостями та розробка обчислювально простих і ефективних алгоритмів їхньої комп'ютерної реалізації; методи - гнучкого докінгу, деформованого багатогранника (симплекс), найкоротшого спуску, Ньютона, квазіньютонівським і I-BFGS, квантово хімічні, силових полів, α -сфер, триангуляція Делоне, GBSA, функції розподілу станів лігандів за ступенями вільності; новизна - вдосконалено метод релаксації електронегативностей за Кіргофом: сформульовано та параметризовано нову модель емпіричного

розрахунку точкових атомних зарядів органічних сполук шляхом релаксації електронегативностей за формалізмом Кіргофа, створено нове силове поле для оцінки енергії міжмолекулярних взаємодій низькомолекулярних органічних сполук із молекулярно-біологічними мішенями на основі розробленого методу розрахунку точкових атомних зарядів, розроблено нову модифікацію GBSA-методу обчислення енергії, необхідної для перенесення низькомолекулярної органічної сполуки з водного середовища у неполярну кишеню центру зв'язування біополімеру, запропоновано оригінальну модель передбачення афінності низькомолекулярних органічних сполук до молекулярно-біологічних мішеней, яка адекватно враховує зміну ентропії при утворенні комплексу, для потреб ВПВС in silico створено обчислювальні прості алгоритми комп'ютерного передбачення афінності низькомолекулярних органічних сполук до молекулярно-біологічних мішеней та перевірено їх ефективність на репрезентативній вибірці лігандів, для яких відомі експериментально встановлені константи зв'язування, створено лабораторний програмний комплекс для потокової оцінки спорідненості низькомолекулярних органічних сполук до молекулярно-біологічних мішеней. Із застосуванням розробленої технології ідентифіковано нові високоефективні інгібітори протеїнкінази CK2; галузь - біотехнологія.

2. The object is a development of small organic compound to biomolecular target in silico affinity prediction technology including new theoretical models and computations algorithms; the goal is a development of in silico affinity prediction technology with improved accuracy and computationally efficient algorithms; the methods are flexible molecular docking, simplex, steepest descent, Newton, quasinewtons l-BFGS, methods of quantum chemistry, force fields, a-shapes, Delaunay triangulations, GBSA, distribution functions of ligand in binding site of biomolecular target; the novelty lies in improved and parameterized Kirchhoff method of point charges calculations, developed new force field, improved GBSA desolvation energy prediction method, new model of affinity predictions, computationally effective algorithms of affinity prediction and laboratory software system for high-throughput receptor-based virtual screening, a few new inhibitors of protein kinase CK2 were identified with applying of developed system; the field is biotechnology.

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 ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бджола Володимир Григорович

2. Bdzhola Volodymyr Grygorovych

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.01, 03.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Говорун Дмитро Миколайович

2. Govorun Dmytro Mykolaiovych

Кваліфікація: д.б.н., 03.00.03

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. Тукало Михайло Арсентійович

2. Тукало Михайло Арсентійович

Кваліфікація: д.б.н., 03.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Нипорко Олексій Юрійович

2. Нипорко Олексій Юрійович

Кваліфікація: к.б.н., 03.00.11

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**

Єльська Ганна Валентинівна

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

Єльська Ганна Валентинівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.