Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U102120

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-12-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Деркач Галина Олегівна
2. Derkach Halyna Olehivna

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: 13-11-2020

Спеціальність за освітою: 7,12020101 фармація

Місце роботи здобувача: Івано-Франківський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010758

Місцезнаходження: вулиця Галицька, буд. 2, м. Івано-Франківськ, Івано-Франківська обл., 76018, 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 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: Івано-Франківський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010758

Місцезнаходження: вулиця Галицька, буд. 2, м. Івано-Франківськ, Івано-Франківська обл., 76018, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров`я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 76.31.30

Тема дисертації:

1. Синтез та вивчення кореляції «структура – біологічна активність» похідних 5-амінометилентіазолідинонів.

2. Synthesis and study of correlations "structure - biological activity" derivatives 5-aminomethylenethiazolidinones

Реферат/анотація:

1. Об’єкти – реакції [2+3]-циклоконденсації, амінолізу, гідразинолізу, тіонування, Кньовенагеля, а також мультикомпонентні хімічні процеси; мета – досліджені методів синтезу та деяких перетворень амінометилентіазолідинонів, скринінг фармакологічної активності, відбір сполук-лідерів для встановлення залежності «структура – активність»; методи – органічний синтез, спектроскопія ЯМР, хромато-мас-спектрометрія, елементний аналіз, рентгеноструктурний аналіз (РСА), фармакологічні дослідження in vitro та in vivo, COMPARE та SAR аналіз, молекулярний докінг; новизна – розроблено методи синтезу неописаних в літературі похідних 5-амінометилентіазолідинонів як сполук з прогнозованою біологічною активністю; встановлено, що 5-етокси-метилентіазолідинони легко взаємодіють з такими нуклеофілами як функціоналізовані первинні і вторинні ароматичні та аліфатичні аміни в середовищі спиртів з утворенням відповідних єнамінів; при вивченні реакції амінолізу 5-етоксиметилентіазолідинонів показано можливість заміни етоксигрупи на аміногрупу шляхом використання в якості «донора» аміаку гідрокарбонату амонію;

встановлено, що використання 3,5-диарилпіразолінів в якості амінокомпоненти при взаємодії з 5-етоксиметилентіазолідинонами є ефективним підходом до дизайну піразолін-тіазолідинонових кон'югатів у контексті реалізації «гібрид-фармакофорного» підходу у створенні нових «лікоподібних молекул»; виявлено, що взаємодія (2Н-[1,2,4]-тріазол-3-ілсульфаніл)-оцтової кислоти з триетилортоформіатом в ацетангідриді є двохстадійним процесом, що включає реакції гетероциклізації та конденсації за метиленактивною групою з утворенням 5-етоксиметилентіазоло[3,2-b][1,2,4]тріазол-6-ону; показано, що етиловий естер 5-етоксиметилен-2-(4-оксо-2-тіоксотіазолідин-3-іл)-3-фенілпропіонової кислоти та 5-етокси-метилентіазоло[3,2-b][1,2,4]тріазол-6-он легко взаємодіють з аліфатичними, ароматичними та гетероциклічними амінами, а також гідрокарбонатом амонію в середовищі спиртів з утворенням відповідних єнамінів; вперше встановлено, що взаємодія 5-етоксиметилентіазоло[3,2-b][1,2,4]тріазол-6-ону з гідразин-гідратом в етанолі проходить з рециклізацією проміжного єнаміну і утворенням важкодоступного 4-(2Н-[1,2,4]тріазол-5-ілсульфаніл)-1,2-дигідропіразол-3-ону; результати – розроблено методи синтезу та перетворень 5-амінометилентіазолідинонів та їх функціональних похідних; відібрано нові високоефективні сполуки з протистафілококовою, антикандидозною, протипухлинною, антитрипаносомною та протизапальною активністю, які рекомендовані для подальших поглиблених досліджень; встановлено ряд закономірностей в контексті залежності «структура – дія» і прогностичні характеристики для молекулярного дизайну потенційних «лікоподібних» молекул; впроваджено – у науковий процес вищих навчальних закладів; галузь – фармація.

2. 1. Objects – reactions [2+3]-cyclocondensation, aminolysis, hydrazinolysis, thionization, Knevenagel reaction and multicomponent chemical processes; aim –study of methods of synthesis and some transformations of aminomethylenethiazolidinones, screening of pharmacological activity, selection of leading compounds to establish the dependence «structure - activity»; methods – organic synthesis, NMR spectroscopy, chromato mass spectrometry, elemental analysis, X-ray diffraction analysis, in vitro and in vivo pharmacological studies, COMPARE and SAR analysis, molecular docking; novelty – developed methods for the synthesis of undescribed in the literature derivatives of 5-aminomethylenethiazolidinones as compounds with predicted biological activity; it was found that 5-ethoxy-methylenethiazolidinones easily interact with such nucleophiles as functionalized primary and secondary aromatic and aliphatic amines in the environment of alcohols with the formation of the corresponding enamines; when studying the aminolysis reaction of 5-ethoxymethylenethiazolidinones, the possibility of replacing the ethoxy group with an amino group by using as a "donor" ammonia ammonium bicarbonate; it was found that the use of 3,5-diarylpyrazolines as an amino component in interaction with 5-ethoxymethylenethiazolidinones is an effective approach to the design of pyrazoline-thiazolidinone conjugates in the context of the "hybrid-pharmacophore" approach in the creation of new "drug-like molecules"; found that the interaction of (2H-[1,2,4]-triazol-3-ylsulfanyl)-acetic acid with triethylorthoformate in acetic anhydride is a two-step process involving heterocyclization and condensation reactions on the methylene active group to form 5-ethoxymethylene [3-b][1,2,4]triazol-6-one; shown that 5-ethoxymethylene-2-(4-oxo-2-thioxothiazolidin-3-yl)-3-phenylpropionic acid ethyl ester and 5-ethoxymethylenethiazolo [3,2-b][1,2,4]triazole -6-one easily interacts with aliphatic, aromatic and heterocyclic amines, as well as ammonium bicarbonate in the environment of alcohols with the formation of the corresponding enamines; it was found that the interaction of 5-ethoxymethylenethiazolo [3,2-b][1,2,4]triazol-6-one with hydrazine hydrate in ethanol passes with the recycling of the intermediate enamine and the formation of hard-to-reach 4-2H-[1,2,4]triazol-5-ylsulfanyl)-1,2-dihydropyrazol-3-one; results – developed methods of synthesis and conversion of 5-aminomethylenethiazolidinones and their functional derivatives; selected new highly effective compounds with antistaphylococcal, anticandidal, antitumor, antitrypanosomal and anti-inflammatory activity, which are recommended for further in-depth research; established a number of patterns in the context of the dependence "structure - activity" and prognostic characteristics for the molecular design of potential "drug-like" molecules; introduced – into the educational process of higher educational institutions; branch – 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. Лесик Роман Богданович

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. Перехода Ліна Олексіївна
2. Perekhoda Lina O.

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. Воскобойнік Олексій Юрійович

2. Voskoboinik Oleksii Yuriiovych

Кваліфікація: д.мед.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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Антонюк Володимир Олександрович

2. Antonyuk Volodymyr

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. Музиченко Володимир Панасович

2. Muzychenko Volodymyr Panasovych

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. Лубенець Віра Ільківна

2. Lubenets Vira I

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

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.