Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U101688

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-10-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Очеретнюк Алла Дмитрівна
2. Ocheretniuk Alla Dmytrivna

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: 15-10-2020

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, 1, м. Київ, Київська обл., 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, 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: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 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. Тіазолієві солі як інгібітори холінестераз

2. Thiazolium salts as cholinesterase inhibitors

Реферат/анотація:

1. Інгібування ацетил- та бутирилхолінестерази інгібіторами з тіазолієвим скафолдом. Запропоновано новий напрям конструювання потенційних інгібіторів холінестераз із тіазолієвим скафолдом. На основі досліджень in vitro вперше показано, що О-ацилзаміщені похідні вітаміну В1 здатні селективно інгібувати ацетилхолінестеразу (AChE) або бутирилхолінестеразу (BChE). Встановлено, що похідні 3-фенацил-4-метил-5-заміщених солей тіазолію можуть інгібувати активність BChE і AChE, демонструючи мікромолярні значення IC50. При цьому О-адамантоїлзаміщені 3-фенацил-4-метил-5-(2-гідрокси)етилтіазолієві солі селективно інгібують активність BChE у порівнянні з впливом на AChE. Продемонстровано потенціал О-ацилзаміщених похідних 3-бензил-5-(2-гідроксиетил)-4-метилтіазолій хлориду як перспективних наномолярних інгібіторів AChE і BChE, що характеризуються значною селективністю стосовно однієї із холінестераз. Вперше встановлено кінетичні закономірності інгібування AChE і BChE О-ацилзаміщеними

тіазолієвими солями і проведено аналіз їх активності в залежності від структури замісників у положеннях 3 і 5 гетероциклу. На основі розрахунків методом молекулярного докінгу обгрунтовано молекулярні механізми і запропоновано способи зв'язування інгібіторів в активному і периферичному центрах ензимів.

2. Inhibition of acetyl- and butyrylcholinesterase by inhibitors with thiazolium scaffold. A new direction of designing potential cholinesterase inhibitors with thiazolium scaffold was proposed. Based on in vitro studies, selective AChE and BChE inhibitors have been found for the first time among O-acyl-substituted vitamin B1 derivatives. It was found that derivatives of 3-phenacyl-4-methyl-5-substituted thiazolium salts can inhibit the activity of BChE and AChE, demonstrating micromolar IC50 values. It was discovered that O-adamantoyl-substituted 3-phenacyl-4-methyl-5-(2-hydroxy)ethylthiazolium salts are able of selectively inhibit BChE in comparison with AChE. The potential of O-acyl-substituted 3-benzyl-5-(2-hydroxyethyl)-4-methylthiazole chloride derivatives as promising nanomolar inhibitors of AChE and BChE, who characterized by significant selectivity for one of the cholinesterases was established. For the first time, kinetic regularities of inhibition of AChE and BChE by O-acyl-substituted thiazolium salts were established, and their activity was analyzed depending on the structure of the substituents in positions 3 and 5 of the heterocycle. Based on molecular docking calculations, molecular mechanisms have been substantiated and modes for the inhibitor binding to the active and peripheral active sites have been proposed.

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дубей Ігор Ярославович

2. Dubey Igor Ya.

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. Шатурський Олег Ярославович

2. Shaturskiyy Oleg

Кваліфікація: д. б. н., 03.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

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.