Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0513U000511

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-05-2013

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Перехода Ліна Олексіївна

2. Perekhoda Lina Oleksiivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор 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: 20-05-2013

Спеціальність за освітою:

Місце роботи здобувача: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: 61002, м.Харків, вул.Пушкінська, 53

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.605.01

Повне найменування юридичної особи: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: вул. Пушкінська, 53, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61002, 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: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: 61002, м.Харків, вул.Пушкінська, 53

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 76.31.35

Тема дисертації:

1. Молекулярне моделювання та цілеспрямований синтез протисудомних засобів похідних п’ятичленних ди(три)азагетероциклів

2. Molecular modeling and purposeful synthesis of anticonvulsants among derivatives of five-membered di(three)azaheterocycles

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена розробці методології раціонального пошуку БАР протисудомної дії в рядах похідних п’ятичленних ди(три)азагетероциклів. Розроблений алгоритм комплексного підходу до молекулярного конструювання БАР, що включає ЛСП, PASS прогноз, молекулярний докінг, синтез перспективних субстанцій, фармакологічний скринінг на протисудомну активність, SAR та QSAR-аналіз Коректність запропонованого алгоритму доведена експериментально - шляхом синтезу біля 300 похідних 1-R-5-метил(аміно)-4-R-сульфоніл-1,2,3-тріазолу(1H), анілідів 1-R-5-метил(аміно)-1,2,3-тріазол(1H)-4-карбонових кислот, 1-R-1,2,3-тріазол(1H)-4,5-дикарбонових кислот та їх метилових естерів, похідних [1,2,4–тріазоло(1,5–а]піримідину, амідів 5-R-1,3,4-окса(тіа)діазол-2-іл-тіоацетатної кислоти, 5-R-2-меркапто-1,3,4-оксадіазол-2-ілтіо-1-фенонів та даними фармакологічних досліджень. Для даної групи речовин вперше здійснено молекулярний докінг до протисудомних біомішеней, SAR, 2D та 3D QSAR аналіз. Виявлена

сполука-лідер –3-хлор-4-метоксіанілід 1-(3'-фторфеніл)-5-метил-1,2,3-тріазол(1H)-4-карбонової кислоти – епіфін. Для цієї субстанції розроблено проект МКЯ.

2. The thesis is devoted to the development of the methodology for rational design of new biologically active substances as potential anticonvulsants among the derivatives of five-membered di(three)azaheterocycls. The developed algorithm of the integrated approach to molecular design of biologically active substances includes the LSP, PASS prediction, molecular docking, synthesis perspective substans, on the basis of the planned pharmacological properties, pharmacological screening for anticonvulsant activity, SAR and QSAR-analysis. The correctness of the algorithm proposed has been proved experimentally – by synthesis about 300 derivatives of 1-R-5-methyl(amino)-4-R-sulfonyl-1,2,3-triazoles(1H), anilides of 1-R-5-methyl(ami¬no)-1,2,3-triazole(1H)-4-carboxylic acid, 1-R-1,2,3-triazole(1H)-4,5-dicarboxylic acids and their methyl esters, derivatives of 1,2,4-triazolo(1,5–a]pyrimidines, amides of 5-R-1,3,4-oxa(thia)diazol-2-ylthioacetic acid, 5-R-2-mercapto-1,3,4-oxadiazol-2-ylthio-1-phenones and by the pharmacological screening of substances synthesised for anticonvulsant activity. For this group of compounds we examined molecular docking to anticonvulsants target to optimize further screening; SAR, 2D and 3D QSAR analysis for the first time. The leader substance 3-chloro-4-methoxyanilide of 1-(3'-fluorophenyl)-5-methyl-1,2,3-triazole(1H)-4-carboxylic acid – epifin have been chosen. For this substance MCQ has been draft.

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. Георгіянц Вікторія Акопівна

2. Georgiyants Viktoriya Akopivna

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. Петюнін Геннадій Павлович

2. Петюнін Геннадій Павлович

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коваленко Сергій Івановмч

2. Коваленко Сергій Івановмч

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

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Черних Валентин Петрович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Черних Валентин Петрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.