Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U003162

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-09-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гринюкова Анастасія Віталіївна
2. Anastasia V. Grynyukova

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 091

Назва наукової спеціальності: Біологія

Галузь / галузі знань: біологія

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: 34622 Біоорганічна хімія (091 Біологія)

Дата захисту: 30-10-2024

Спеціальність за освітою: Біохімія

Місце роботи здобувача: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): 6936

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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. Академіка Кухаря, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 31.23.21

Тема дисертації:

1. Цитотоксична дія довголанцюгових похідних імідазазолу як потенційних протиракових агентів із селективним типом дії: in silico та in vitro дослідження

2. Cytotoxic effect of long-chain imidazole derivatives as potential anticancer agents with a selective type of action: in silico and in vitro studies

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена актуальній науково-практичній проблемі цілеспрямованому пошуку, аналізу та дослідженню біологічно активних довголанцюнових похідних імідазолу та піридину як потенційних мішень-орієнтованих протиракових засобів селективного типу дії. В роботі вперше продемонстровано протираковий потенціал довголанцюгових похідних імідазолу методами in silico та in vitro як ефективних біологічно активних агентів із селективним механізмом дії щодо нейробластоми, мієлогенного лейкозу та аденокарциноми гортані людини. За отриманими in vitro результатами цитотоксичної активності досліджених похідних на моделях ліній ракових клітин нейробластоми людини (SK-N-DZ), аденокарциноми гортані людини (HEp-2) та мієлогенного лейкозу людини (K562) встановлено

ряд закономірностей між протираковими властивостями досліджених похідних імідазолу та особливостями їхньої хімічної будови. Розроблені у процесі досліджень нові QSAR-моделі потенційної активності похідних імідазолію щодо нейробластоми, мієлогенного лейкозу та аденокарциноми людини високою прогнозованою здатністю розміщено на сервері OCHEM є вільними для доступу науковців, які працюють в області пошуку та розробки протиракових засобів. Моделі представляються успішним інструментом для пошуку та аналізу нових протиракових агентів відповідної структури та механізму дії. Досліджено антиоксидантний ефект та токсичність сполук в умовах гострого експерименту

2. The Ph.D. thesis is dedicated to the current scientific and practical problem of targeted search, analysis, and investigation of biologically active long-chain derivatives of imidazole and pyridine as potential target-oriented anticancer agents with a selective type of action. In this thesis, the anticancer potential of long-chain imidazole derivatives was demonstrated by using in silico and in vitro methods as a selective anticancer agents against human neuroblastoma, myelogenic leukemia, and laryx adenocarcinoma. The studied test articles has demonstrated a selective cytotoxic effect against neuroblastoma, myelogenous leukemia, and adenocarcinoma of the human larynx. With respect to acquired in vitro data cytotoxic activity of imidazolium derivatives against human neuroblastoma (SK-N-DZ), human epidermoid carcinoma of the larynx (HEp-2) and human myelogenous leukemia (K562), a relationship between the anticancer properties of the studied imidazole derivatives and the characteristics of their chemical structure have been established. The newly developed QSAR models of anticancer effect of imidazolium derivatives against neuroblastoma, myelogenous leukemia and human adenocarcinoma, with high predictive ability, have been made available on the OCHEM server for free access by researchers working in the field of anticancer drug discovery and development. These models are presented as a tool for the search and analysis of new anticancer agents with relevant structures and mechanisms of action. The antioxidant effect and toxicity of the compounds under acute experimental conditions have been investigated.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- Gryniukova A., Borysko P., Myziuk I., Alieksieieva D., Hodyna D., Semenyuta I., Kovalishyn V., Metelytsia L., Rogalsky S., Tcherniuk S. Anticancer activity features of imidazole-based ionic liquids and lysosomotropic detergents: in silico and in vitro studies. Mol. Divers 2024, 1-17
- Gryniukova A., Kaiser F., Myziuk I., Alieksieieva D., Leberecht C., Heym P.P., Tarkhanova O.O., Moroz Yu.S., Borysko P., Haupt V.J. AI-powered virtual screening of large compound libraries leads to the discovery of novel inhibitors of Sirtuin-1. J Med Chem 2023, 66(15), 10241-10251
- Hodyna D., Kovalishyn V., Semenyuta I., Rogalsky S., Trokhimenko O., Gryniukova A., Metelytsia L. Ester-functionalized imidazolium- and pyridinium-based ionic liquids: design, synthesis and cytotoxicity evaluation. Biointerface Research in Applied Chemistry. 2022, 12, 2905–2957
- Chiba S., Ohue M., Gryniukova A., Borysko P., Zozulya S., Yasuo N., Yoshino R., Ikeda K., Shin W.-H., Kihara D., Iwadate M., Umeyama H., Ichikawa T., Teramoto R., Hsin K.-Y., Gupta V., Kitano H., Sakamoto M., Higuchi A., Miura N., Yura K., Mochizuki M., Ramakrishnan C., Thangakani A.M., Sekijima M. A prospective compound screening context identified broader inhibitors for sirtuin 1. Scientific Reports 2019, 9, 19585

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0117U000100, 0122U000837

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Метелиця Лариса Олексіївна
2. Metelytsia Larysa O.

Кваліфікація: д. б. н., професор, 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стасевич Марина Володимирівна
2. Maryna V. Stasevych

Кваліфікація: д. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Галкін Олександр Юрійович
2. Halkin Oleksandr Yu.

Кваліфікація: д. б. н., професор, 03.00.20

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37, Київ, 03056, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дерев'янчук Михайло Вікторович
2. Michael V. Derevyanchuk

Кваліфікація: к. б. н., с.н.с., 02.00.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Качковський Олексій Дмитрович
2. Kachkovsky Oleksiy D.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Циганкова Вікторія Анатоліївна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Циганкова Вікторія Анатоліївна
Відповідальний за підготовку облікових документів	Шутко М.М
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна