Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0407U003135

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-07-2007

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Голуб Андрій Григорович
2. Golub Andriy Grygorovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 03.00.03

Назва наукової спеціальності: Молекулярна біологія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 19-06-2007

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: 34.15.15

Тема дисертації:

1. In silico дизайн інгібіторів протеїнкінази CK2
2. In silico design of protein kinase CK2 inhibitors

Реферат:

1. Об'єкт - інгібіторна активність низькомолекулярних органічних сполук щодо протеїнкінази CK2 людини; мета - розробка нових низькомолекулярних інгібіторів CK2 людини та дослідження їхньої взаємодії з амінокислотними залишками активного центру CK2 методами комп'ютерного моделювання; методи - гнучкий молекулярний докінг, метод молекулярної динаміки, метод термодинамічної інтеграції, біохімічне тестування активності протеїнкіназ in vitro; новизна - уперше проведено розрахунок та дослідження молекулярної динаміки CK2 людини та її комплексів з низькомолекулярними інгібіторами, уперше побудовано модель взаємодії нових інгібіторів з амінокислотними залишками активного сайту CK2 та визначено міжмолекулярні контакти, що обумовлюють активність нових інгібіторів, уперше встановлено залежність біологічної активності розроблених інгібіторів від їхньої хімічної структури, уперше вивчено специфічність нових інгібіторів CK2 в ряду протеїнкіназ; результати - ідентифіковано низку нових інгібіторів CK2 серед комбінаторнихбібліотек 4-амінохіназолінів та 4-амінохінолінів, а також два нових специфічних

класи інгібіторів CK2 - тетрагалогено-1,3-діоксо-2,3-дигідроізоіндоли та 3-карбокси-4-(1H)-хінолони; галузь - молекулярна біологія.

2. The object is inhibitory activity of small organic compounds towards human protein kinase CK2; the goal is development of new small molecule inhibitors and study their interactions with amino acid residues of the CK2 ATP binding site by molecular modeling methods; the methods are flexible molecular docking, molecular dynamics, thermodynamic integration, in vitro kinase assays; the novelty - calculation and investigation of the molecular dynamics of human CK2 and its complexes with new inhibitors, development of the binding mode for new CK2 inhibirtors, analysis of the structure-activity relationships of new CK2 inhibitors, analysis of the selectivity of new CK2 inhibitors; the results - identification of a number of new CK2 inhibitors among the 4-aminoquinazoline and 4-aminoquinoline derivatives, identification of 2 novel classes of CK2 inhibitors - tetrahalogeno-1,3-dioxo-2,3-dihydroisoindoles and 3-carboxy-4-(1H) quinolones; the field is molecular biology.

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. Ярмолюк Сергій Миколайович
2. Yarmoluk Sergiy Mykolayovych

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. 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. Качковський Олексій Дмитрович
2. Качковський Олексій Дмитрович

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Корнелюк Олександр Іванович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Корнелюк Олександр Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Т.А.