Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U004431

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-11-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Приходько Андрій Олександрович
2. Prykhod'ko Andriy Oleksandrovych

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: 28-10-2016

Спеціальність за освітою:

Місце роботи здобувача: Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

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 26.220.01

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 молекулярної біології і генетики НАН України

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: 31.23

Тема дисертації:

1. Пошук нових інгібіторів протеїнкінази СК2 серед похідних 4Н-4-хроменону
2. The search of new protein kinase CK2 inhibitors among derivatives of 4H-4-chromenone

Реферат:

1. Синтетичні низькомолекулярні інгібітори протеїнкінази СК2 на основі похідних 4Н 4 хроменону та їх комплекси із протеїнкіназою СК2. Пошук нових інгібіторів СК2 за допомогою методів молекулярного моделювання, хімічного синтезу та біохімічного тестування. Молекулярний докінг, біохімічне тестування, хімічний синтез, ТШХ, спектроскопія, ЯМР-спектрометрія. Синтезовано похідні 3-арилоксихромону, флавону та тетрагалогенфталіміду, відібрані методом молекулярного докінгу. Розроблено методики синтезу нових 7 (3 діалкіламіно-2-гідроксипропокси) похідних 3-арилоксихромону. Встановлено залежність інгібувальної дії синтезованих сполук від їх хімічної структури. Розроблені моделі зв'язування використано для передбачення нових серій більш активних інгібіторів. В результаті подальшої хімічної оптимізації синтезовано 40 наномолярних інгібіторів СК2, шість з яких проявили високу селективність інгібування щодо СК2 та пропонуються для використання в наукових дослідженнях з метою вивчення структури й особливостей функціонування СК2. Запропоновані способи зв'язування з протеїнкіназою СК2 та встановлені

залежності інгібувальної активності сполук від їх структури можуть бути використані під час розробки нових високоефективних інгібіторів протеїнкіназ. Сфера використання-біоорганічна хімія.

2. The synthetic small molecular inhibitors of protein kinase CK2 on the basis of 4H-4-chromenone derivatives and their complexes with protein kinase CK2. The search of new inhibitors of CK2 using methods of molecular modeling, chemical synthesis and biochemical testing. The molecular docking, biochemical testing, chemical synthesis, TLC, spectroscopy, NMR spectrometry. On the basis of molecular docking results the derivatives of 3-aryloxychromone, flavone and tetrahalogenphtalimide have been synthesized. The methods for synthesis of novel 7 (3-dialkylamino-2-hydroxypropoxy) derivatives of 3-aryloxychromone have been developed. Structure-activity relationships (SAR) of the synthesized compounds were studied. The established binding models were used for prediction of the ways for further chemical optimization with the aim to obtain more active inhibitors. As a result of this optimization 40 nanomolar CK2 inhibitors have been developed, among them six compounds demonstrated high selectivity toward CK2 and can be used in further research to study structure and cellular functions of this protein kinase. The binding models of inhibitors with protein kinase CK2 and SAR can be used for the development of novel highly potent protein kinase inhibitors. Field of application is bioorganic chemistry.

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. Yarmolyuk Sergiy Mykolayovych

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.10, 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. Смолій Олег Борисович
2. Смолій Олег Борисович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.10, 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. Демченко Анатолій Михайлович
2. Демченко Анатолій Михайлович

Кваліфікація: д.фарм.н., 15.00.02, 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 Кухар Валерій Павлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Кухар Валерій Павлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.