Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0417U001322

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-03-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Старосила Сергій Анатолійович

2. Starosyla Sergiy Anatolijovych

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: 28-02-2017

Спеціальність за освітою: 091

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 26.237.01

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 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: 34.15

Тема дисертації:

1. Розробка фармакофорних моделей та інгібіторів протеїнкіназ ASK1, FGFR1 і CK2

2. Development of pharmacophore models and inhibitors of protein kinases ASK1, FGFR1 and CK2

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розробці фармакофорних моделей та низькомолекулярних інгібіторів протеїнкіназ ASK1, FGFR1 і CK2 людини методами комп'ютерного моделювання та біохімічного тестування. Побудовано та валідовано in silico ліганд-орієнтовану фармакофорну модель інгібіторів ASK1. Побудовано та експериментально валідовано рецепторно-орієнтовані фармакофорні моделі інгібіторів протеїнкіназ CK2 і FGFR1. Розроблено й охарактеризовано шість нових класів інгібіторів: бензотіазол-2-іл-3-гідрокси-5-феніл-1,5-дигідропірол-2-они - для ASK1, 2-(феніламіно)-5-(фенілметиліден)-4,5-дигідро-1,3-тіазол-4-они і тетразоло[1,5-c]хіназоліни - для CK2, 3-(1-бензил-1H-індол-3-іл)-2-ціаноакрилові кислоти, [(фенілметиліден)аміно]тіосечовини, піридин-3-карбонітрили - для FGFR1. Розроблено алгоритм оптимізації фармакофорних моделей і рескорингу результатів фармакофорного скринінгу.

2. The thesis is devoted to the development of pharmacophore models and low-molecular inhibitors for human protein kinases ASK1, FGFR1 and CK2 using methods of computer modeling and biochemical testing. Ligand-based

pharmacophore model of ASK1 inhibitors was developed and validated in silico. Receptor-based pharmacophore models of FGFR1 and CK2 inhibitors were developed and experimentally validated. Six novel classes of inhibitors were identified: benzothiazol-2-yl-3-hydroxy-5-phenyl-1,5-dihydro-pyrrol-2-ones - for ASK1, 2-(phenylamino)-5-(phenylmethylidene)-4,5-dihydro-1,3-thiazol-4-ones and tetrazolo[1,5-c]quinazolines - for CK2, 3-(1-benzyl-1H-indol-3-yl)-2-cyanoacrylic acids, N-[(phenylmethylidene)amino]thioureas, pyridine-3-carbonitriles - for FGFR1. The algorithm for pharmacophore model optimization and rescoring of pharmacophore screening results was developed.

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. Колибо Денис Володимирович

2. Колибо Денис Володимирович

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. Карпов Павло Андрійович

2. Карпов Павло Андрійович

Кваліфікація: к.б.н., 03.00.20

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 Єльська Ганна Валентинівна

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Єльська Ганна Валентинівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.