# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0414U000566

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 14-03-2014

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Чеканов Максим Олександорович

2. Chekanov Maxim Olexandrovich

**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:** 28-02-2014

**Спеціальність за освітою:** 20.33

**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:** 31.23.29

**Тема дисертації:**

1. Комп'ютерний дизайн та синтез похідних 2-фенілізотіазолідин-3-он-1,1-діоксиду і 2-амінопіримідинону як інгібіторів протеїнкінази CK2

2. Computer aided design and synthesis of 2-phenylisothiazolidin-3-one-1,1-dioxide and 2-aminopyrimidinone derivatives as protein kinase CK2 inhibitors

**Реферат/анотація:**

1. Інгібувальна активність низькомолекулярних органічних сполук щодо протеїнкінази CK2 людини. Розробка інгібіторів протеїнкінази CK2 на основі похідних 2-фенілізотіазолідин-3-он-1,1-діоксиду та 2-амінопіримідинону за допомогою методів комбінаторної хімії та комп'ютерного моделювання. Лабораторний органічний синтез, комбінаторний синтез, гнучкий молекулярний докінг, ЯМР-спектроскопія, хромато-мас-спектрометрія, тонкошарова хроматографія. Розроблено методи синтезу нових похідних 2-фенілізотіазолідин-3-он-1,1-діоксиду та 2-амінопіримідинону як низькомолекулярних інгібіторів протеїнкінази CK2. Досліджено залежність інгібувальної активності синтезованих сполук від їх хімічної структури. Побудовано моделі зв'язування розроблених інгібіторів з АТФ-акцепторним сайтом CK2. Сфера використання - біоорганічна, медична та фармацевтична хімія.

2. Inhibitory activity of small molecule organic compounds against human protein kinase CK2. Development of protein kinase CK2 inhibitors on the basis of 2-phenylisothiazolidin-3-one-1,1-dioxide and 2-aminopyrimidinone by methods of combinatorial chemistry and computer modeling. Laboratory organic synthesis, combinatorial synthesis, flexible molecular docking, NMR spectroscopy, gas chromatography-mass spectrometry, thin-layer chromatography. Methods for the synthesis of new derivatives of 2-phenylisothiazolidin-3-one-1,1-dioxide and 2-aminopyrimidinone as small molecule inhibitors of protein kinase CK2 have been developed. The structure activity relationship has been investigated for the synthesized compounds. The binding modes of the developed inhibitors in ATP-acceptor site of CK2 have been suggested. Scope of application is bioorganic, medicinal and pharmaceutical 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. Yarmoluk Sergiy Mykolayovich

**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. Обушак Микола Дмитрович

2. Обушак Микола 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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Демченко Анатолій Михайлович

2. Демченко Анатолій Михайлович

**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** 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.