

Звіт аспіранта III року навчання

Коваленко С.В.

Тема дисертаційної роботи: Біологічна активність частково гідрованих нітрогенвмісних гетероциклічних сполук

Науковий керівник: д.х.н., професор Десенко С.М.

1. За звітній період в рамках освітньо-наукової програми третього рівня вищої освіти з “13” січня 2022 року по “04” лютого 2022 року було виконано асистентську педагогічну практику загальною кількістю 50 годин під час викладання к.х.н. М.Ю. Горобцем дисципліни **“Підготовка наукових публікацій та проєктів”** для аспірантів ДНУ “НТК “Інститут монокристалів” НАН України. Асистентська педагогічна практика містила лекційний та практичний матеріал стосовно обрання можливих об’єктів інтелектуальної власності з використанням власних наукових результатів і пропонування їх до патентування, опрацювання проведення патентного пошуку за обраним об’єктом інтелектуальної власності за допомогою безоплатних Internet-ресурсів (патентних баз даних) з оновленням власної бібліотеки літературних джерел.

2. За звітній період опубліковано

- Sumit Kumar, Svitlana Kovalenko, Shakshi Bhardwaj, Aaftaab Sethi, Nikolay Yu. Gorobets, Sergey M. Desenko, Poonam, Brijesh Rathi **“Drug repurposing against SARS-CoV-2 using computational approaches”**, Drug Discovery Today, 2022
- Tkachenko I.G., Kovalenko S.V., Tkachenko V.V. **“Molecular docking for express identification of potential psychoactive substances”**, book of abstracts to the 85 years of Vasyl’ Stus Donetsk National University and the International Year of Basic Sciences for Sustainable Development, March 22–24, 2022, Vinnytsia

3. За звітній період за допомогою спеціалізованого програмного забезпечення було проведено скринінг сполук з ряду ацилгідразонів та виявлено перспективні N-ацилгідразони як потенційні інгібітори (модулятори активності) SIRT1 із визначенням геометрії комплексу ліганд-рецептор і оцінкою вільної енергії зв’язування ліганду з активним центром мішені.

На даний час отримані результати готуються до публікації у складі статті з робочою назвою **“New Derivatives of N-acylhydrazones as SIRT1 Inhibitors”** з очікуваним авторським колективом: Victoria V. Lipson, Fedir G. Yaremenko, Volodymyr M. Vakula, Svitlana V. Kovalenko, Sergiy M. Desenko, Petro O. Borisko, Sergiy O. Zozulya, Andriy O. Tolmachev.

Аспірант



С. Коваленко