

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005369

Державний реєстраційний номер: 0123U101863

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка нових QSAR-моделей для прогнозування активності та синтез нових хімічних сполук гетероциклічної природи як антимікробних та протівірусних агентів.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445599800, 380445585388

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Президія Національної академії наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1382.500

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Прогнозування біоактивності та створення сучасних підходів до синтезу гетероциклічних сполук для потреб фармацевтичної промисловості. Розділ 2. Розробка нових QSAR-моделей для прогнозування активності і синтез нових хімічних сполук гетероциклічної природи як антимікробних, протівірусних та протиракових агентів

Назва роботи англійською:

Prediction of bioactivity and creation of modern approaches to the synthesis of heterocyclic compounds for the needs of the pharmaceutical industry. Chapter 2. Development of new QSAR models for activity prediction and synthesis of new chemical compounds of heterocyclic nature as antimicrobial, antiviral and anticancer agents

Реферат українською:

Побудовано ряд нових QSAR-моделей, їх використання дозволило успішно ідентифікувати ряд похідних азолів як високо активні антибактеріальні агенти проти стандартного штаму *E. coli* (типу ATCC), а також як потенційні протівірусні агенти. Була оцінена протівірусна активність проти HCMV *in vitro* нових сульфамідних похідних. *In silico* та *in vitro* результати досліджень щодо антибактеріального та протівірусного потенціалу ряду похідних 1,3-оксазолу, 1,3-тіазолу представляються перспективними в рамках пошуку та конструювання нових низькомолекулярних гетероциклічних сполук із відповідними особливостями структури та специфічним молекулярним механізмом дії. Експериментальне вивчення та аналіз п'ятичленних азотистих гетероциклів як антимікробних та протівірусних агентів засвідчило перспективність подальших досліджень у напрямку їх структурної оптимізації та розширення спектру біологічних досліджень.

Реферат англійською:

A number of new QSAR models were built, and their use made it possible to successfully identify a number of azole derivatives as highly active antibacterial agents against the standard strain of *E. coli* (type ATCC), as well as as potential antiviral agents. Antiviral activity against HCMV *in vitro* of new sulfonamide derivatives was evaluated. *In silico* and *in vitro* results of research on the antibacterial and antiviral potential of a number of 1,3-oxazole, 1,3-thiazole derivatives are promising in the search and construction of new low molecular weight heterocyclic compounds with appropriate structural features and a specific molecular mechanism of action. Experimental study and analysis of five-membered nitrogenous heterocycles as antimicrobial and antiviral agents proved the perspective of further research in the direction of their structural optimization and expansion of the spectrum of biological research.

Індекс УДК: 547.64, 547.73, 547.8

Коди тематичних рубрик: 31.21.25.09, 31.21.27.05, 31.21.27.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Броварець Володимир Сергійович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Нові QSAR-моделі для прогнозування біоактивності та синтез нових гетероциклів як низькомолекулярних антимікробних та протівірусних агентів.

Назва НТП англійською: New QSAR models for predicting bioactivity and synthesis of new heterocycles as low molecular weight antimicrobial and antiviral agents.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Установи НАН України та освіти, охорона здоров'я, сільське господарство

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створено нові QSAR-моделі та використано їх для прогнозування антибактеріальної активності ряду похідних азолів проти стандартного штаму *E. coli* (типу ATCC), а також як потенційні протівірусні агенти. Нові сульфамідні похідні оксазолу були досліджені на активність проти цитомегаловірусу людини *in vitro*. Ряд похідних 1,3-оксазолу, 1,3-тіазолу представляються перспективними в рамках пошуку та конструювання нових низькомолекулярних гетероциклічних сполук із відповідними особливостями структури та специфічним молекулярним механізмом дії. Експериментальне вивчення та аналіз п'ятичленних азотистих гетероциклів як антимікробних та протівірусних агентів засвідчило перспективність подальших досліджень у напрямку їх структурної оптимізації та розширення спектру біологічних досліджень.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Споживачі продукції: Науковці у галузі органічної хімії та медичної хімії, виробники ліків.

Перспективні ринки: Україна, країни Євросоюзу, США

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Semenyuta I.V., Hodyna D.M., Kovalishin V.V. [et al.] 5-Amino-4-cyano-1,3-oxazoles as new antibacterials against antibiotic-resistant *Escherichia coli* strains. Scientific practice: Modern and classical research methods. May 26, 2023. Boston, USA. P. 117–121. doi: 10.36074/logos-26.05-2023.
2. Hodyna D.M., Kovalishin V.V., Derevianko K. Yu. [et al.] 1,3-Oxazole derivatives as antibacterials against colistin-resistant *Acinetobacter Baumannii* strains. The process and dynamics of the scientific path. IV International Scientific and Theoretical Conference. 16 June, 2023, Athens, Hellenic Republic: European Scientific Platform. P. 83–85. doi: 10.3674/scientia-16.06.2023
3. Zhirnov V., Shablykin O., Chumachenko S., [et al.]. In vitro activity of novel 4-iminohydantoin sulfamide derivatives against human cytomegalovirus. Chem Papers. Chem. Papers. 2023. <https://doi.org/10.1007/s11696-023-03038-1>.
4. Kovalishyn V., Severin O., Kachaeva M. [et al.]. Design and experimental validation of the oxazole and thiazole derivatives as potential antivirals against of human cytomegalovirus. SAR QSAR Environ Res. 2023 Jul-Sep. Vol. 34(7). P. 523–541. doi: 10.1080/1062936X.2023.2232992
5. Severin O.O., Kachaeva M.V., Pilyo S.G. [et al.]. Synthesis, characterization and study of anti-HPV activity and cell cytotoxicity of novel 1,3-oxazole-4-carbonitrile and 4-sulfonylamide-5-phenyl-1,3-thiazole derivatives in vitro. Letters in Applied Nanobioscience. 2023 <https://doi.org/10.33263/LIANBS120.000>

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Багрєєва Оксана Сергіївна

Година Діана Миколаївна

(к.б.н., 02.00.10)

Головченко Олександр Володимирович

(к. х. н., 02.00.10)

Дерев'янка Катерина Юріївна

Жирнов Віктор Валентинович

(д. мед. н., 14.03.06)

Зябров Володимир Стефанович

(к.х.н., 02.00.03)

Качаєва Марина Володимирівна

(02.00.10)

Ковалішин Василь Володимирович

(к.х.н., 02.00.10)

Метелиця Лариса Олексіївна

(к. б. н., 14.03.06)

Москвіна Вікторія Сергіївна

(к. х. н., 02.00.03)

Мітюхін Олег Петрович

(к.х.н., 02.00.06)

Панчишин Світлана Ярославівна

(к.х.н., 02.00.03)

Порхун Світлана Василівна

Пільо Степан Григорович

(к.х.н., 02.00.03)

Северін Олександр Олегович

Семенюта Іван Володимирович

(к.б.н., 02.00.10)

Чумаченко Світлана Анатоліївна

(к.х.н., 02.00.10)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Бондаренко О.М.

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

