

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U005257

Державний реєстраційний номер: 0122U002191

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-12-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Пошук та синтез противірусних агентів серед похідних оксазолів, тiazолів та оксадіазолів

Початок етапу: 03.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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:

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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 70.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пошук та синтез протівірусних агентів серед похідних азотистих гетероциклів

Назва роботи англійською:

Search and synthesis of antiviral agents among nitrogencontaining heterocycle derivatives

Реферат українською:

На основі сформованої бази даних хімічних сполук похідних азолів з протівірусними властивостями за допомогою онлайн платформи OCHEM створено нові QSAR-моделі з високою стабільністю та прогнозуючою здатністю щодо цитомегаловірусу, вірусу вітряної віспи та папіломавірусу. Ідентифіковано та запропоновано для досліджень 16 сполук. Найбільш перспективними для подальшого вивчення виявилися такі сполуки: 5-(4-(3-(4-метоксифеніл)-1,2,4-оксадіазол-5-іл)піперидин-1-іл)-2-(п-толіл)оксазол-4-карбонітрил проти цитомегаловірусу людини (штам AD169), а також 5-(2-(гідроксиметил)піролідин-1-іл)-2-феніл-1,3-оксазол-4-карбонітрил і 5-(біс(2-гідроксиетил)аміно)-2-феніл-1,3-оксазол-4-карбонітрил проти вірусу вітряної віспи (штам Еллен). Отримані результати є фундаментальними і можуть бути використані для конструювання нових протівірусних засобів щодо різних вірусних штамів.

Реферат англійською:

New QSAR models with high stability and predictive ability for cytomegalovirus, varicella zoster virus and papillomavirus were created on the basis of the formed database of chemical compounds of azole derivatives with antiviral properties using the OCHEM online platform. 16 compounds have been identified and proposed for research. The following compounds were the most promising for further study: 5-(4-(3-(4-methoxyphenyl)-1,2,4-oxadiazol-5-yl)piperidin-1-yl)-2-(p-tolyl)oxazol-4-carbonitrile against human cytomegalovirus (strain AD169), as well as 5-(2-(hydroxymethyl)pyrrolidin-1-yl)-2-phenyl-1,3-oxazole-4-carbonitrile and 5-(bis(2-hydroxyethyl)amino)-2-phenyl-1,3-oxazole-4-carbonitrile against varicella zoster virus (Ellen strain). The obtained results are fundamental and can be used to design new antiviral agents against different virus strains.

Індекс УДК: 547.73

Коди тематичних рубрик: 31.21.27.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Качаєва Марина Володимирівна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Хімічні сполуки – похідні оксазолу, які виявилися активними щодо різних вірусних штамів, препаративні методи їх синтезу, наукові публікації.

Назва НТП англійською: Chemical compounds - oxazole derivatives active against various viral strains, preparative methods of their synthesis, scientific publications.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: біоорганічна хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі даних QSAR моделювання було синтезовано та протестовано 16 хімічних сполук на основі оксазольного та оксадіазольного скафолдів. Розроблено та удосконалено препаративні методи синтезу нових 5-аміно-4-ціано-1,3-оксазолів, 5-(4-(1,2,4-оксадіазол-5-іл)піперидин-1-іл)-2-оксазолів, оксазол-5-сульфоніламідів, та бісоксазолсульфонамідів. У результаті in vitro дослідження похідних азолу виявлено найбільш перспективні для подальшого вивчення сполуки (5-(4-(3-(4-метоксифеніл)-1,2,4-оксадіазол-5-іл)піперидин-1-іл)-2-(п-толіл)оксазол-4-карбонітрил проти цитомегаловірусу людини (штам AD169), а також 5-(2-(гідроксиметил)піролідин-1-іл)-2-феніл-1,3-оксазол-4-карбонітрил і 5-(біс(2-гідроксиетил)аміно)-2-феніл-1,3-оксазол-4-карбонітрил проти вірусу вітряної віспи (штам Еллен). На основі отриманих результатів підготовлена 1 стаття, опубліковано 2 тези доповідей на наукових конференціях.

Соціально-економічна спрямованість НТП: 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: 03.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Хімія, медицина

Перспективні ринки: Україна

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. Kovalishyn V., Severin O., Kachaeva M., Kobzar O., Keith K.A., Harden E.A., Hartline C.B., James S.H., Vovk A., Brovarets V. In silico design and experimental validation of novel oxazole derivatives against varicella zoster virus // Molecular Diversity. – 2022.
2. Severin O.O., Kachaeva M.V., Hodyna D.M., Kovalishyn V.V., Pilyo S.G., Brovarets V.S. In silico study and in vitro activity of novel oxazole derivatives against human cytomegalovirus / Всеукраїнська наукова конференція «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи» (5 жовтня 2022 року). Матеріали конференції. – Житомир: 2022. – С. 109–111.
3. Severin O.O., Kachaeva M.V., Hodyna D.M., Pilyo S.G., Brovarets V.S. In vitro activity of novel oxazole derivatives against human papillomavirus / II Інтернет-конференція молодих вчених «Перспективи хімії в сучасному світі» (23 листопада 2022 року). Матеріали конференції. – Житомир: 2022. – С. 40–41.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович
д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Година Діана Миколаївна
(к.б.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**

