Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U005817

Державний реєстраційний номер: 0120U100310

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Вивчення механізмів біоактивності органічних сполук як інгібіторів терапевтично важливих ферментів.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Проміжний 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: 380442960409, 380445732552

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2206.991

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пошук, конструювання і вивчення механізмів дії нових біологічно активних сполук на основі природних і синтетичних скафолдів

Назва роботи англійською:

Search, design and study of the action mechanisms of new biologically active compounds based on natural and synthetic scaffolds

Реферат українською:

В результаті досліджень ідентифіковано нові піразолоновмісні інгібітори ксантиноксидази зі скафолдом фуран-2-ілбензойної кислоти. З'ясовано механізми інгібування і встановлено залежність інгібувального впливу досліджених сполук від наявності альбуміну in vitro. За допомогою методу молекулярної динаміки досліджено механізми інгібування ксантиноксидази піразолоновмісними похідними 3-(гідразиніл)- і 4-(гідразиніл)бензойної кислоти. Представлено результати вивчення інгібувальної активності щодо нуклеотидпірофосфатази/фосфодіестерази 1 синтезованих 6-заміщених похідних пурину та його гетероциклічних ізостерів – піразоло[3,4-d]піримідину та піроло[2,3-d]піримідину. Проведено оцінку параметрів ADMET і досліджено in vitro вплив нових похідних калікс[4]аренів на активність низки терапевтично важливих ферментів. Виявлено, що тетракіс-заміщені на верхньому вінці калікс[4]арени з N-карбамоїлбензолсульфонамідними та тіоксотетрагідропіримідиновими залишками можуть бути ефективними і селективними інгібіторами глутатіон-S-трансфераз. Отримані результати є важливими для пошуку і створення нових інгібіторів метаболізму пуринів, а також нових регуляторів біохімічних процесів за участю нуклеотидпірофосфатаз і глутатіон-S-трансфераз.

Реферат англійською:

As a result of the research, new pyrazolone-containing xanthine oxidase inhibitors with a furan-2-ylbenzoic acid scaffold were identified. The mechanisms of the enzyme inhibition were clarified and the dependence of the inhibitory effect of the investigated compounds in the presence of albumin in vitro was established. Mechanisms of xanthine oxidase inhibition by pyrazolone-containing derivatives of 3-(hydrazinyl)- and 4-(hydrazinyl)benzoic acid were investigated using a molecular dynamic method. The study results of the inhibitory activity against nucleotide pyrophosphatase/phosphodiesterase 1 of synthesized 6-substituted derivatives of purine and its heterocyclic isosteres (pyrazolo[3,4-d]pyrimidine and pyrrolo[2,3-d]pyrimidine) are presented. ADMET parameters were evaluated and the in vitro effect of new derivatives of calix[4]arenes on the activity of several therapeutically important enzymes was investigated. It was found that tetrakis-substituted calix[4]arenes with N-carbamoylbenzenesulfonamide and thioxotetrahydropyrimidine substituents on the upper rim can be effective and selective inhibitors of glutathione S-transferases. The obtained results are important for the search and creation of new inhibitors of purine metabolism, as well as new regulators of biochemical processes involving nucleotide pyrophosphatases and glutathione S-transferases.

Індекс УДК: 577.16, 547.96:577, 577.17;577.12.05

Коди тематичних рубрик: 31.23.23, 31.23.27.09, 31.27.37

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Вовк Андрій Іванович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, чл-кор.НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

1. Kobzar O. L., Tatarchuk A. V., Mrug G. P., Bondarenko S. P., Demydchuk B. A., Frasinyuk M. S., Vovk A. I. Carboxylated chalcones and related flavonoids as inhibitors of xanthine oxidase. Medicinal Chemistry Research. 2023, 32(8), 1804-1815.

2. Кобзар О.Л., Черенок С.О., Кальченко В.І., Вовк А.І. Макроциклічні інгібітори піруватдекарбоксилази. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / За загальною ред. А.І. Вовка – Київ: Інтерсервіс, 2023. С. 38-42.

3. Музичка О.В., Музичка Л.В., Кобзар О.Л., Смолій О.Б., Вовк А.І. Синтез та інгібувальний вплив 6-заміщених ізостерів пурину на активність нуклеотидпірофосфатази/фосфодіестерази 1. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / За загальною ред. А.І. Вовка – Київ: Інтерсервіс, 2023. С. 142-147.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Броварець Володимир Сергійович
д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Булденко Владислав Миколайович
(к.х.н., 02.00.10)

Гуща Тетяна Олегівна
(к.ф.-м.н., 01.04.00)

Кобзар Олександр Леонідович
(к. х. н., 02.00.10)

Микула Марія Сергіївна
(н.с)

Музичка Оксана Володимирівна
(к.х.н., 02.00.10)

Міщенко Ірина Миколаївна
(к.х.н., 02.00.10)

Суховєєв Олександр Володимирович
(к.х.н., 02.00.10)

Танчук Всеволод Юлійович
(к.х.н., 02.00.10)

Татарчук Альона Віталіївна

Шульга Юрій Васильович
(д.філософ)

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна