Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U007227

Державний реєстраційний номер: 0111U006518

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-05-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Теоретичне та експериментальне обґрунтування застосування нових комп'ютерних технологій у розробці ефективних засобів проти збудників актуальних інфекцій

Початок етапу: 01.2011

Закінчення етапу: 12.2013

Вид звітного документа: Без звіту

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державна установа "Український науково-дослідний протичумний інститут ім. І.В.Мечнікова"

Код за ЄДРПОУ: 05480915

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (048) 723 81 72

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізична особа

Код за ЄДРПОУ: 11111111

Місцезнаходження: Бульвар Ігоря Шамо 13, м. Київ, Київ, 02154, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380977973144

Внесок співвиконавця у звітний етап:

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство охорони здоров' я України

Код за ЄДРПОУ: 00012925

Місцезнаходження: вул. Грушевського, 7, м. Київ, Київ, 01021, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442536194

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): 2301020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1428.6

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Теоретичне та експериментальне обґрунтування застосування нових комп'ютерних технологій у розробці ефективних засобів проти збудників актуальних інфекцій

Назва роботи англійською:

Theoretical and experimental study on the use of new computer technologies in the development of effective agents against pathogens topical infections

Реферат українською:

Розроблені нові принципи створення експертних комп'ютерних систем для віртуального скринінгу, конструювання та прогнозування рівня активності противірусних сполук, зокрема протигрипозних. За допомогою QSAR-технологій можна оптимізувати схеми комбінованого застосування противірусних та протимікробних препаратів для профілактики та лікування післягрипозних ускладнень. Проведені дослідження дозволяють значно збільшити базу даних органічних сполук різних класів з відомим рівнем специфічної активності для генерації навчаючих та тестових виборок з метою вирішення задач QSAR, що є суттєвим внеском в розробку експертної системи для позаекспериментального скринінгу протигрипозних сполук. За допомогою QSAR-технологій проводилась оптимізація схем комбінованого застосування препаратів з різним механізмом дії в разі їх сумісного використання з метою профілактики та лікування післягрипозних ускладнень, викликаних збудниками бактеріальних інфекцій. В результаті виконання НДР: - Отримані QSAR-моделі з межами придатності, спроможні прогнозувати протигрипозну активність сполук. - Виявлені структурні фактори, що впливають на прояв протигрипозної активності сполук. - Вивчена в експерименті противірусна активність оригінальних та відомих сполук на моделі протигрипозної дії препаратів in vitro, що дозволяє розширити базу QSAR. Використання цієї бази дає можливість вирішувати складні проблеми створення противірусних засобів з меншими витратами та більшою ефективністю. - Вивчена противірусна активність препаратів з різним механізмом дії і створена виборка QSAR для оптимізації схем комбінованого застосування препаратів з різним механізмом дії. - За допомогою застосування QSAR-технологій оптимізовані схеми комбінованого використання препаратів для профілактики та лікування післягрипозних ускладнень. - Відпрацьований алгоритм розрахунку синергичної дії сумішей, який в подальшому можна використовувати для визначення найбільш ефективних доз будь-яких препаратів. - Розроблені нові принципи створення експертних комп'ютерних систем для віртуального скринінгу, конструювання та прогнозування активності противірусних препаратів. Важливість отриманих результатів полягає у тому, що такий науковий підхід дозволяє значно сприяти розширенню арсеналу ефективних протигрипозних препаратів, а також оптимізувати схеми їх використання за цільовим призначенням.

Реферат англійською:

New guidelines have been developed for the creation of expert systems for computer virtual screening , designing and predicting the activity level of antiviral compounds, in particular influenza . These studies can significantly increase the database of different classes of organic compounds with specific activity prior to generate training and testing samples for the purpose of solving QSAR. This is a significant contribution to the development of an expert system for screening vneeksperimentalnogo influenza compounds. The optimization schemes of combined use of drugs with different mechanisms of action at their joint use for the prevention and treatment bacterial infections with using QSAR-technology. As a result of R & D:- Obtained QSAR-model with boundaries application capable to predict influenza activity of the compounds.- Determined by structural factors that affect the manifestation of influenza activity of the compounds.- Original and antiviral activity of known compounds was studied on the model of anti-influenza action of drugs in vitro, thus expanding the base QSAR. Using this database allows to solve complex problems of creation of antiviral agents with lower cost and higher efficiency. - Studied

the antiviral activity of drugs with different mechanisms of action and QSAR established sampling schemes to optimize the combined use of drugs with different mechanisms of action. - Optimized scheme combined use of drugs for the prevention and treatment of influenza complications using QSAR-technologies. -Algorithm for calculating the synergistic action of mixtures developed. It can then be used to determine the most effective dose of any drug. - Developed new principles of expert computer systems for virtual screening assay design and prediction of activity of antiviral drugs.Importance of these results is that a scientific approach can significantly contribute to the expansion arsenal effective influenza drugs, and optimize their use of scheme for the intended purpose

Індекс УДК: 615.281, 615.45

Коди тематичних рубрик: 34.25.37

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лозицький Віктор Петрович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Pozdnyakov Sergey Vasylevich

Перелік осіб-виконавців

Григорашева Ірина Миколаївна

Гридіна Тетяна Леонідівна

Кулібаба Олена Володимирівна

Лозицький Віктор Петрович

Мудрик Любов Михайлівна

Федчук Алла Семенівна

Шитікова Лариса Іванівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

