

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0216U007469

Державний реєстраційний номер: 0114U003042

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2016

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Розрахункове та експериментальне дослідження фармакологічних показників синтезованих сполук.

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 558-52-66, 573-25-52

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 02033333

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

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (044) 234-32-43

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.): 993.3
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Комп'ютерний дизайн нових біоактивних сполук та дослідження зв'язку структура-активність

Назва роботи англійською:

Computer design of new bioactive compounds and studying of the relationships between the structure and activity.

Реферат українською:

На основі аналізу більше 15000 молекул мікробних інгібіторів створено 68 ефективних QSAR моделей для прогнозування антимікробної активності нових сполук проти широкого ряду бактеріальних та грибкових культур. Проведено молекулярний докінг-аналіз цитотоксичних властивостей ряду похідних оксазолу. Експериментально досліджено антимікробні властивості ряду перспективних похідних ізоніазиду, оксазолу та іонних рідин із прогнозованою активністю. Запропоновано ряд сполук як оригінальні об'єкти для поглибленого вивчення в якості потенційних антимікробних, біоцидних та протипухлинних агентів із специфічним молекулярним механізмом дії.

Реферат англійською:

On the base of analysis more than 15000 molecules of microbial inhibitors the 68 efficient QSAR models for prediction of the antimicrobial activities of new compounds against a wide range bacterial and fungic cultures were created. A molecular docking-analysis of the cytotoxic properties of a number of oxazole derivatives was carried out. The antimicrobial properties of a number of perspective derivatives of an izoniazid, oxazole and ionic liquids with the predicted activity were experimentally studied. The series of compounds as original objects for an in-depth study as potential antimicrobial, biocidal and antitumour agents with the specific molecular mechanism of action have been offered.

Індекс УДК: 577.21:576.314;576.52;577.352, 577.21; 576.314; 577.352

Коди тематичних рубрик: 34.15.37

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Метелиця Лариса Олексіївна

Науковий ступінь: к.б.н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Прогнозуючі QSAR моделі антимікробної активності нових похідних ізоніазиду та імідазолієвих іонних рідин, ефективність яких підтверджена експериментальними дослідженнями.

Назва НТП англійською: The predicting QSAR models of the antimicrobial activity of new isoniazid derivatives and imidazolium ionic liquids with experimentally confirmed efficiency is confirmed.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: медицина, фармакологія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: За результатами комп'ютерного прогнозування та молекулярного докінг-аналізу біологічно активних низькомолекулярних сполук виявлено ряд цитостатиків та антимікробних агентів як перспективних біоцидних та протипухлинних засобів із специфічним молекулярним механізмом дії.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначаються НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Вищі учбові та НДІ як фундам-го, так і прикладного профілю роботи в області хімії природних сполук, хімії полімерів, екології та біотехнологій.

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

Перелік осіб-виконавців

І.В.Семенюта

І.М.Коперник

В.В. Ковалішин

В.М.Благодатний

Л.Є.Калашнікова

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

