

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U107204

Державний реєстраційний номер: 0120U100310

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Цілеспрямований пошук, конструювання і вивчення властивостей нових біоактивних гетероциклічних сполук.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього 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. Мурманська, буд. 1, м. Київ, Київська обл., 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, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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.): 2252.840

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:

У звіті представлено результати вивчення властивостей нових біоактивних сполук. Метою дослідження була загальна характеристика нових синтетичних органічних речовин і структурних аналогів природних сполук як потенційних білкових лігандів і антиоксидантів. Завдання дослідження стосувалися прогнозування і оцінки активності нових сполук в модельних системах *in vitro* та *in silico*. В результаті виконання досліджень було знайдено, що похідні роданіну можуть ефективно інгібувати активність глутатіон-S-трансфераз, зокрема людської рекомбінантної GST A1-1. Проаналізовано зв'язок між структурою і активністю макроциклічних калікс[4]арен-п-кетофосфонових та калікс[4]арен-п-гідроксиметилен-бісфосфонових кислот з алкільними замісниками на нижньому вінці макроциклічної платформи як інгібіторів малатдегідрогенази. Вивчено кооперативні ефекти структурних аналогів тіаміну в процесах агрегації сироваткового альбуміну та досліджено їх інгібувальну дію при утворенні амілоїдних структур. За допомогою комп'ютерних розрахунків оцінено можливість розташування N-алкілоксикарбоніл-4-метил-5-(2-гідроксиетил)тіазолій хлоридів в модельному каналі, що сформований молекулами антибіотика амфотерицину. Продемонстровано антирадикальні властивості похідних 1,3-оксазолу. Методом молекулярної динаміки вивчено розташування нітроксильних радикалів з адамантановим скафолдом в мембранних структурах.

Реферат англійською:

The results of studying the properties of the new bioactive compounds are present in the report. The aim of the study was *in vitro* and *in silico* characterization of the synthetic organic compounds and structural analogues of natural substances as potential protein ligands and antioxidants. According to the obtained results, rhodanine derivatives can effectively inhibit the activity of glutathione S-transferases, in particular human recombinant GST A1-1. Structure–activity relationship for calix[4]arene-*p*-ketophosphonic and calix[4]arene-*p*-hydroxymethylenbisphosphonic acids bearing alkyl substituents on the lower rim of the macrocyclic platform as malate dehydrogenase inhibitors was analyzed. The cooperative effects of structural thiamine analogues on serum albumin aggregation and their inhibitory effect in the formation of amyloid structures have been studied. The possibility of locating N-alkyloxycarbonyl-4-methyl-5-(2-hydroxyethyl)thiazolium chlorides in a model channel formed by amphotericin B have been established using computer calculations. The antiradical properties of 1,3-oxazole derivatives have been demonstrated. The properties of nitroxyl radicals with adamantane scaffold in membrane systems were analyzed by the molecular dynamics method.

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, член-кор.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Інформація про нові біологічно активні сполуки, створені на основі природних і синтетичних скафолдів, як лігандів терапевтично важливих ферментів і білків.

Назва НТП англійською: Information about new biologically active compounds with natural and synthetic scaffolds, as ligands of therapeutically important enzymes and proteins.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Біоорганічна хімія, біохімія, фармакологія, медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Встановлено, що похідні роданіну виявляють інгібувальний вплив на активність глутатіон-S-трансфераз. Знайдено, що калікс[4]арен-п-кетифосфонові та калікс[4]арен-п-гідроксиметиленабісфосфонові кислоти інгібують активність малатдегідрогенази. Показано, що структурні аналоги тіаміну можуть впливати на агрегацію сироваткового альбуміну і утворення амілоїдних структур. Встановлено, що N-алкілоксикарбоніл-4-метил-5-(2-гідроксиетил)тіазолій хлориди можуть розташовуватись в каналі, що сформований амфотерицином. Досліджено антирадикальні властивості похідних 1,3-оксазолу. Вивчено властивості нітроксильних радикалів з адамантановим скафолдом в мембранних структурах *in silico*.

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:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Наукові установи, установи НАН України, Установи МОЗ України

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. Shatursky O.Ya., Manoilov K.Yu., Gorbatiuk O.B., Usenko M.O., Zhukova D.A., Vovk A.I., Kobzar O.L., Triakash I.O., Borisova T.A., Kolibo D.V., Komisarenko S.V. The geometry of diphtheria toxoid CRM197 channel determined with thiazolium salts and nonelectrolytes. *Biophysycal Journal*. 2021. Vol. 120. P. 2577-2591.
2. Sukhoveev O.V., Burlaka Y.B., Grin N.V., Vovk A.I., Verevka S.V. Studies of alterations of the cellular membrane barrier function at laryngeal cancer. *Medical and Clinical Chemistry*. 2021. P. 5-12.
3. Музичка О.В., Шабликін О.В., Суховєєв О.В., Броварець В.С., Вовк А.І. Синтез і антиоксидантні властивості спін-мічених похідних пурину та ізоксазолу. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали. Київ: Інтерсервіс. 2021. С. 77-81.
4. А.І. Вовк, О.Л. Кобзар, Ю.М. Пархоменко. О-ацилзаміщені похідні і структурні аналоги вітаміну В1 . В кн. Синтез і біоактивність функціоналізованих азотовмісних гетероциклів та їх конденсованих похідних. За редакцією А.І. Вовка. Київ: Інтерсервіс. 2021. С. 151-180.
5. Синенко В., Шульга Ю., Кобзар О. Тіазоловмісні похідні роданіну як інгібітори глутатіон S-трансфераз. Збірник наукових праць: XVIII наукова конференція «Львівські хімічні читання». 2021. 369.
6. Гуца Т., Микула М., Вовк А. Взаємодія вітаміну В1 з сироватковим альбуміном та індукована лігандом агрегація білка. Збірник наукових праць: XVIII наукова конференція «Львівські хімічні читання». 2021. ОЗ1.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Булденко Владислав Миколайович

(к.х.н., 02.00.10)

Гуца Тетяна Олегівна

(к.ф.-м.н., 01.04.00)

Кобзар Олександр Леонідович

(к.х.н., 02.00.10)

Мельник Андрій Костянтинович

Микула Марія Сергіївна

Музичка Оксана Володимирівна

(к.х.н., 02.00.10)

Міщенко Ірина Миколаївна

(к.х.н., 02.00.10)

Суховерхов Олександр Володимирович

(к.х.н., 02.00.10)

Танчук Всеволод Юлійович

(к.х.н., 02.00.10)

Татарчук Альона Віталіївна

Шульга Юлія Олександрівна

Відповідальний за підготовку

Бондаренко О.М.

облікових документів

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

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

