Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U105704

Державний реєстраційний номер: 0117U004134

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-08-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Синтез ряду похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну, що містить залишки фторовмісних гама-амінокислот. Вивчання антиагрегаційної активності серед похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну. Синтез потенційних лігандів малого жолобу ДНК (похідні дигідразидів кислот - біскарбоксиалкіламідів піридин-2,6-дикарбонової кислоти, похідні біфенілу), як противірусних агентів та індукторів інтерферону, з протизапальними властивостями. Скринінг in vitro синтезованих сполук. Аналіз отриманої інформації щодо зв'язку "структура-властивості". Створення бази даних та побудова класифікаційних та кількісних QSPR співвідношень, що моделюють проникнення біологічноактивних сполук (лігандів ДНК) через штучні біомембрани для прогнозування біодоступності потенційних лікарських засобів. Це дозволе оцінювати пасивне проникнення (дифузію) і є недорогою альтернативою клітинних моделей для первинного ADME скринінгу.

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

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, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

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.): 1143.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез, структура, властивості та молекулярні механізми дії нових антитромботичних і противірусних засобів.

Назва роботи англійською:

Synthesis, structure, properties and molecular mechanisms of action of new antithrombotic and antiviral agents.

Реферат українською:

Мета дослідження: Синтез ряду похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну, що містить залишки фторовмісних α-амінокислот. Вивчання антиагрегаційної активності серед похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну. Синтез похідних дигідразидів кислот – біскарбоксиалкіламідів піридин-2,6-дикарбонової кислоти та похідні біфенілу, як противірусних агентів, з протизапальними властивостями. Скринінг in vitro синтезованих сполук. Аналіз отриманої інформації щодо зв'язку "структура-властивості". Синтезовано ряд похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну, що містить залишки фторовмісних α-амінокислот. Вивчено антиагрегаційної активності серед похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну. Синтезовано потенційні ліганди малого жолобу ДНК (похідні дигідразидів кислот – біскарбоксиалкіламідів піридин-2,6-дикарбонової кислоти, похідні біфенілу), як противірусні агенти та індуктори інтерферону, з протизапальними властивостями. Здійснено скринінг in vitro синтезованих сполук. Здійснено аналіз зв'язку "структура-властивості" для отриманої інформації. Синтезовані 6-Н-індоло[3,2-b]хіноксаліни. Конденсацією 6-бромонафталевого ангідриду із амоніаком, гідразингідратом та гідроксиламіном, синтезували похідні нафталіміду. Конденсацією нінгідрину із заміщеними 1,2-диамінобензенами синтезовані нові похідні інденохіноксаліну, з останніх – відповідні оксими. Здійснено скринінг in vitro синтезованих сполук. Ці сполуки, як і раніше синтезовані, досліджені на здатність інгібувати індуковану продукцію прозапальних цитокінів in vitro та інгібувати розвиток набряку, викликаного карагінаном. Виявлені сполуки активні in vitro та in vivo. Здійснено аналіз отриманої інформації щодо зв'язку "структура-властивості". Методами QSAR прогнозовані потенційні противірусні агенти. Створено бази даних та побудовано класифікаційні та кількісні QSPR співвідношення, що моделюють проникнення біологічноактивних сполук (лігандів ДНК) через штучні біомембрани для прогнозування біодоступності потенційних лікарських засобів.

Реферат англійською:

The aim of the study: Synthesis of a number of derivatives of 2-(piperazin-1-yl) quinazoline containing residues of fluorine-containing α-amino acids. Study of antiplatelet activity among 2- (piperazin-1-yl)quinazoline derivatives. Synthesis of acid dihydrazide derivatives - pyridine-2,6-dicarboxylic acid biscarboxyalkylamides and biphenyl derivatives as antiviral agents with anti-inflammatory properties. In vitro screening of synthesized compounds. Analysis of the obtained information on the relationship "structure-properties". A number of 2-(piperazin-1-yl)quinazoline derivatives containing fluorine-containing α-amino acid residues were synthesized. The antiplatelet activity among 2-(piperazin-1-yl)quinazoline derivatives was studied. Potential ligands of the small gutter DNA (derivatives of acid dihydrazides - biscarboxyalkylamides of pyridine-2,6-dicarboxylic acid, biphenyl derivatives) as antiviral agents and interferon inducers with anti-inflammatory properties were synthesized. In vitro screening of synthesized compounds was performed. The structure-property relationship for the obtained information is analyzed. 6-H-indolo [3,2-b]quinoxalines were synthesized. Condensation of 6-bromonaphthalic anhydride with ammonia, hydrazine hydrate and hydroxylamine synthesized naphthalimide derivatives. Condensation of ninhydrin with substituted 1,2-diaminobenzenes synthesizes new derivatives of indenoquinoxaline, from the latter - the corresponding oximes. In vitro screening of synthesized compounds was performed. These compounds, still synthesized, have been studied for their ability to inhibit the induced production of proinflammatory cytokines in vitro and to inhibit the development of carrageenan-induced edema. The detected compounds are active in vitro

and in vivo. The analysis of the received information on the connection "structure-properties" is carried out. Potential antiviral agents are predicted by QSAR methods. Databases have been created and classification

Індекс УДК: 547.8, 547.891.2: 547.785.5: 547.621: 615.217: 577.32.17.012: 543.422.25:

Коди тематичних рубрик: 31.21.27.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Андронаті Сергій Андрійович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Кількісні моделі зв’язку «структура – властивості» (QSPR) для фармакокінетичних властивостей лікарських препаратів. Похідні 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну та фторовмісних α-амінокислот. Похідні 2-(гомопіперазин-1-іл)хіназоліну та фторовмісних α-амінокислот. Похідні 4-феніл-2-(піперазин-1-іл)хіназоліну та фторовмісних α-амінокислот. Біс-гідразони похідних дипіколінової кислоти з альдегідами, що містять електронно-донорні групи. Гідразони 3-гідрокси-2-нафтойної кислоти з альдегідами, що містять електронно-донорні групи.

Назва НТП англійською: Derivatives of 2- (piperazin-1-yl) quinazoline and fluorine-containing α-amino acids. Derivatives of 2- (homopiperazin-1-yl) quinazoline and fluorine-containing α-amino acids. Derivatives of 4-phenyl-2- (piperazin-1-yl) quinazoline and fluorine-containing α-amino acids. Bis-hydrazones of dipicolinic acid derivatives with aldehydes containing electron-donor groups. Hydrazones of 3-hydroxy-2-naphthoic acid with aldehydes containing electron-donor groups.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У звіті представлено молекулярний дизайн, методи синтезу та підтвердження структури похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну та похідних біскарбоксиалкіламідів піридин-2,6-дикарбонової кислоти та похідні біфенілу. Скринінг in vitro синтезованих сполук. Аналіз отриманої інформації щодо зв'язку "структура-властивості".

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, 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: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Андронаті С.А., Корнилов О.Ю., Поліщук П.Г., Крисько А.А., Крисько О.Л., Кабанова Т.А., Самбурський С.Е. Синтез та антиагрегаційна активність антагоніста □IIb□3 рецепторів на основі 2-(4-піперазин-1-іл)-3H-хіназолін-4-ону. Доповіді НАН України. – 2019.- № 9. - С. 60 - 67.

Zanoza S.O., Klimenko K.O., Maltzev G.V., Bykova T.I., Levandovskiy I.A., Lyakhov S.A., Andronati S.A., Bondarev M.L. Aminoalkoxyfluorenones and aminoalkoxybiphenyls: DNA binding modes. Bioorganic Chemistry. – 2019. – V. 86, № . – P. 52 – 60.

Schepetkin I.A., Khlebnikov A.I., Potapov A.S., Kovrizhina A.R., Matveevskaya V.V., Belyanin M.L., Atochin D.N., Zanoza S.O., Gaidarzhy N.M., Lyakhov S.A., Kirpotina L.N., Quinn M.T. Synthesis, biological evaluation, and molecular modeling of 11H-indeno[1,2-b]quinoxalin-11-one derivatives and tryptanthrin-6-oxime as c-Jun N-terminal kinase inhibitors. Eur.J.Med.Chem. – 2019. – V. 161, P. 179 – 191.

Igor A. Schepetkin, Alexander S. Karpenko, Andrei I. Khlebnikov, Marina O.Shibinska, Igor A. Levandovskiy, Liliya N. Kirpotina, Nadezhda V. Danilenko, Mark T. Quinn. Synthesis, anticancer activity, and molecular modeling of 1,4-naphthoquinones that inhibit MKK7 and Cdc25. Eur.J.Med.Chem. – 2019. – V. 183, 111719.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Андронаті Сергій Андрійович
д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Іллюшко Наталія Олександрівна

Андронаті Сергій Андрійович
(д. х. н.)

Кабанова Тетяна Анатоліївна
(к. б. н.)

Карпенко Олександр Сергійович
(к. х. н.)

Корнілов Олександр Юрійович

Крисько Андрій Арнольдович
(к. х. н.)

Кузьмін Віктор Євгенович
(д. х. н., 02.00.03)

Ляхов Сергій Анатолійович
(к.х.н., 02.00.10)

Михайлова Тетяна Вікторівна
(к. х. н.)

Шибінська Марина Олегівна
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Іллюшко Н. О.

Телефон — +38 (067) 724-39-55

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

