

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U001299

Державний реєстраційний номер: 0121U114230

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-01-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Визначити і проаналізувати спектральні характеристики (ІЧ-, ЯМР ^1H -, ^{19}F -спектроскопія, мас-спектрометрія) амонію гексафторосилікатів. Визначити розчинність солей у воді і неводних розчинниках, ступінь гідролізу у $1 \cdot 10^{-4}$ водних розчинах. Встановити спектр потенційної біологічної активності органічних основ, що входять до складу амонієвих катіонів, з використанням методу PASS-прогнозу.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487233324, 380487233567, 380487178905

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487233324

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7704 - власні кошти, кошти підприємств, установ, організацій, фізичної особи на виконання ініціативних робіт

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 30.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

634. Синтез, будова, властивості амонієвих гексафторосилікатів з карієспрофілактичною, протизапальною та антибактеріальною активністю

Назва роботи англійською:

634. Synthesis, structure, properties of ammonium hexafluorosilicates with anti-inflammatory and antibacterial activity

Реферат українською:

Використовуючи 2D-симплексний підхід, побудовано адекватні QSAR PLS-моделі для КПЕ і МІ досліджуваних солей. Для підтвердження не випадковості побудованих QSAR моделей використана процедура рандомізації (Y-Scrambling). Проведено аналіз відносних внесків різних типів дескрипторів у розрахункові величини досліджуваних властивостей. В результаті структурної інтерпретації побудованих QSAR моделей одержано інформацію щодо напрямку модифікації структур амонієвих гексафторосилікатів для створення більш ефективних та перспективних антикарієсних агентів. За допомогою молекулярного дизайну вдалось сконструювати нову молекулу, у якої певний баланс впливу структурних чинників забезпечує більші значення показників антикарієсної активності, ніж у молекул навчальної вибірки.

Реферат англійською:

Using the 2D-simplex approach, adequate QSAR PLS models were constructed for the KPI and MI of the studied salts. To confirm the non-randomness of the constructed QSAR models, a randomization procedure (Y-Scrambling) was used. An analysis of the relative contributions of different types of descriptors to the calculated values of the studied properties was carried out. As a result of the structural interpretation of the constructed QSAR models, information was obtained regarding the direction of modification of the structures of ammonium hexafluorosilicates to create more effective and promising anticaries agents. Using molecular design, it was possible to construct a new molecule in which a certain balance of the influence of structural factors provides higher values of anticaries activity indicators than in the molecules of the training sample.

Індекс УДК: 615.31, 615:547.419.5

Коди тематичних рубрик: 76.31.35

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Гельмбольдт Володимир Олегович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Сконструйована нова молекула за допомогою молекулярного дизайну, у якої певний баланс впливу структурних чинників забезпечує більші значення показників антикарієсної активності, ніж у молекул початкової вибірки.

Назва НТП англійською: A new molecule was constructed using molecular design, in which a certain balance of the influence of structural factors provides higher values of anti-carries activity indicators than the molecules of the initial sample.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методичні документи

Галузь застосування: медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Використовуючи 2D-симплексний підхід, побудовано адекватні QSAR PLS-моделі для КПЕ і МІ досліджуваних солей. Для підтвердження невинноватості побудованих QSAR моделей використана процедура рандомізації (Y-Scrambling). Проведено аналіз відносних внесків різних типів дескрипторів у розрахункові величини досліджуваних властивостей. В результаті структурної інтерпретації побудованих QSAR моделей одержано інформацію щодо напряду модифікації структур амонієвих гексафторосилікатів для створення більш ефективних та перспективних антикарієсних агентів. За допомогою молекулярного дизайну вдалось сконструювати нову молекулу, у якої певний баланс впливу структурних чинників забезпечує більші значення показників антикарієсної активності, ніж у молекул навчальної вибірки.

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:

Перспективні ринки:

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. Поперечний, Г. В.; Гельмбольдт, В. О. Заміщені похідні 2-, 3-, 4-піридиноцтових кислот як компоненти потенційних антикарієсних агентів. / The 1st International scientific and practical conference "Global trends in science and education" (February 10-12, 2025), SPC "Sci-conf.com.ua". - Kyiv, Ukraine. - 1059 p
- 2.Бородіна, Н.; Голембіовська, О.; Фізор, Н.. Аналіз фенольних сполук верби прутівидної методом ВЕРХ. / Annals of Mechnikov Institute. -2025.- N 1. www.imiamn.org.ua /journal.htm DOI: 10.5281/zenodo.15011204
- 3.Lytvynchuk, I. V.; Anam, E. H. Development of the composition and production technology of caries prevention gel with 3-aminophenylacetic acid hexafluorosilicate / The 12th International scientific and practical conference "Scientific achievements of contemporary society" (June 27-29, 2025). - Cognum Publishing House, London, United Kingdom. - 393 p.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Запорожан Валерій Миколайович
д.мед.н.

Перелік осіб-виконавців

Гельмбольдт Володимир Олегович
(д.х.н., професор)

Голубчик Христина Олегівна
(к.х.н., доц.)

Замкова Альона Вікторівна
(к.б.н., доц.)

Ложичевська Тетяна Вікторівна
(к.х.н., доц.)

Нікітін Олексій Володимирович

Улізко Ігор Віталійович

Фізор Наталя Селіверстівна
(к.фарм.н., доц.)

Шишкін Іван Олегович
(д.філософ)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Ніточко Катерина Олександрівна

Телефон

+380677597889

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна