

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U002819

Державний реєстраційний номер: 0117U000100

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-12-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Узагальнення та систематизація літературних даних про антимікробні властивості водорозчинних іонних рідин на основі катіонів мітилімідазолію, амінімідазолінію, меркаптоімідазолінію, гуанідінію, піридинію, хінолінію та фосфонію хлоридів з алкільним радикалом C12 та антимікробні властивості водонерозчинних іонних рідин із аніоном тетрафторборатом та алкільним замісником C12. Експериментальні дослідження іонних рідин та гетероциклічних сполук похідних азолу як потенційних антибактеріальних біорегуляторів із залученням методів QSAR моделювання та докінг-аналізу.

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітнього документа: Проміжний 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 України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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.): 1324.87
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

QSAR моделювання та експериментальні дослідження властивостей нових потенційно біоактивних сполук.

Назва роботи англійською:

QSAR modeling and experimental studies of new bioactive compounds properties.

Реферат українською:

Методами insilico та in vitro досліджено серію нових похідних азолу, як потенційних антимікробних агентів, отримано дані про спектр їх активності та встановлено молекулярні механізми їх антибактеріальних і антифунгальних властивостей проти мікробних культур *Mycobacterium tuberculosis*, *Staphylococcus aureus* та *Candida albicans*. За результатами досліджень ряд сполук рекомендовано як перспективні оригінальні об'єкти для подальшого вивчення та використання у науково-виробничих процесах для потреб сучасної медицини та фармацевтики.

Реферат англійською:

Series of new azol derivatives as potential antimicrobial agents, were studied by in silico and in vitro methods, their range of activities and molecular mechanism of action against microbial cultures of *Mycobacterium tuberculosis*, *Staphylococcus aureus* and *Candida albicans* are established. Numerous compounds are selected as the most perspective original objects for further studying and using in a scientific and production processes for needs of the modern medicine and pharmaceutics.

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: Класифікаційні та регресійні QSAR моделі, створені для прогнозування протитуберкульозної та анти стафілококової активності нових азолів різної хімічної природи, що відрізняються високими показниками стабільності та збалансованості і можуть успішно використовуватися для пошуку нових біорегуляторів відповідного механізму дії.

Назва НТП англійською: Developed of classification and regression-based QSAR models for antitubercular and antistaphylococcal activity prediction of new azoles with various chemical nature can successfully be used for new bioregulators searching with corresponding action mechanism due to its high stability and balances indexes.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі результатів QSAR прогнозування, докінг-аналізу та експериментальної оцінки серії нових похідних азолу, як потенційних антимікробних агентів, встановлено молекулярний механізм їх дії проти мікробних культур *Mycobacterium tuberculosis*, *Staphylococcus aureus* та *Candida albicans*. Створені QSAR моделі активності та відібрані для подальшого вивчення перспективні сполуки можуть успішно використовуватися у відповідних науково-виробничих процесах для потреб медицини та фармацевтики.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначаються НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НДЗ фундамент.і прикладн.проф. досл-нь органічн.синтезу та хімії природ.сполук.

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:

ІХ. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

Перелік осіб-виконавців

І.В.Семенюта

В.В.Ковалішин

Д.М.Година

Л.Є.Калашнікова

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

