Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U002057

Державний реєстраційний номер: 0122U001220

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-02-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Комп'ютерно-хімічний аналіз, розробка методів синтезу та дослідження реакцій лігандів з суперспіралізованою ДНК

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 72, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380563749800, 380563749850

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 865.510

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез N,O,S-вмісних гетероциклів та дослідження їх взаємодії з нуклеїновими кислотами

Назва роботи англійською:

Synthesis of N,O,S-containing heterocycles and study of their interaction with nucleic acids

Реферат українською:

Предмет дослідження – N,O,S-гетероцикли, каталізатори та ліганди для асимметричного синтезу, суперспіралізована ДНК, олігонуклеотиди ДНК і РНК з неканонічними послідовностями. Об'єкт дослідження – in silico дослідження, прогнозування активності, модифікація і синтез N,O,S-гетероциклів, взаємодія з ДНК і РНК. Мета роботи – цілеспрямоване створення нових нуклеотид-зв'язуючих речовин (лігандів) у ряду N,O,S-гетероциклічних сполук та розробка засад їх подальшого використання у медичній практиці. Проведено аналітичний огляд різних джерел інформації з дослідження взаємодії металоорганічних сполук з нуклеїновими кислотами, зокрема платиновмісних та інших металоорганічних сполук з ДНК та плазмідою. Розроблені методики синтезів нових N,O,S-гетероциклів на основі норборнену та ендикового ангідриду. Проведений комп'ютерно-хімічний аналіз раніше синтезованих N,O,S-гетероциклічних сполук. Досліджено взаємодію біс-диметилсульфоксид-цис-тетрахлороди-μ-півалатодиренію (III) з ДНК тимуса теляти (СТ ДНК) і з оселедцевої сперми (HS ДНК). Сфера застосування: синтетична органічна та неорганічна хімія, біохімія, комп'ютерний аналіз.

Реферат англійською:

The subject of research is N,O,S-heterocycles, catalysts and ligands for asymmetric synthesis, supercoiled DNA, DNA and RNA oligonucleotides with non-canonical sequences. The object of research is in silico research, prediction of activity, modification and synthesis of N,O,S-heterocycles, interaction with DNA and RNA. The purpose of the work is the purposeful creation of new nucleotide-binding substances (ligands) in a number of N,O,S-heterocyclic compounds and the development of principles for their further use in medical practice. An analytical review of various sources of information on the interaction of organometallic compounds with nucleic acids, in particular platinum-containing and other organometallic compounds with DNA and plasmid, was conducted. Methods of syntheses of new N,O,S-heterocycles based on norbornene and endic anhydride have been developed. A computer-chemical analysis of previously synthesized N,O,S-heterocyclic compounds was carried out. The interaction of bis-dimethylsulfoxide-cis-tetrachlorodi-μ-pivalatodirhenium (III) with calf thymus DNA (CT DNA) and herring sperm (HS DNA) was studied. Field of application: synthetic organic and inorganic chemistry, biochemistry, computer analysis.

Індекс УДК: 546.12, 547.7/.8, 577.113;577.123;547.963.3

Коди тематичних рубрик: 31.17.15.33, 31.21.27, 31.23.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Оковитий Сергій Іванович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи синтезу нових N,O,S-гетероциклічних похідних як потенційних нуклеотид-зв'язуючих речовин на основі норборнену та ендикового ангідриду

Назва НТП англійською: Methods of synthesis of new N,O,S-heterocyclic derivatives as potential nucleotide-binding substances based on norbornene and endic anhydride

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 20.14 Виробництво інших основних органічних хімічних речовин

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено методи синтезу нових N,O,S-гетероциклічних похідних як потенційних нуклеотид-зв'язуючих речовин на основі норборнену та ендикового ангідриду. За рахунок залучення сучасних прийомів та методів органічної хімії, таких як каталіз сполуками перехідних металів, мультикомпонентний та однореакторний one-pot синтез, мікрохвильова та ультразвукова активація хімічних реакцій досягнуто високі виходи цільових продуктів. Особливості будови нових гетероциклічних похідних встановлено з використанням сучасних одно- та двовимірних методів ЯМР.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: комбінаторна та медична хімія, Інститут органічної хімії НАН України (м. Київ), Інститут біоорганічної та нафтохімії НАН України (м. Київ), Enamine Ltd. (м. Київ), Укроргсинтез (м. Київ), Дніпровська медична академія (м. Дніпро), НТК «Інститут монокристалів» НАН України (м. Харків)

Перспективні ринки: Естонія, Польща, Словаччина

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

Palchykov, V. Antimicrobial evaluation of arylsulfonamides bearing (aza)norbornane and related motifs / V. Palchykov, N. Manko, N. Finiuk, R. Stoika, N. Pokhodylo, M. Obushak // Med. Chem. Res. – 2022. – Vol. 31, № 2. – P. 284–292. https://doi.org/10.1007/s00044-021-02827-1

Borysenko, I. O. Probability of reaction pathways of amine with epoxides in the reagent ratio of 1:1 and 1:2 / I. O. Borysenko, S. I. Okovytyy, J. Leszczynski // Structural Chemistry. – 2022. – Vol. 33. – P. 2115–2125 https://doi.org/10.1007/s11224-022-01979-z

Shtamburg, V. G. 3-Alkoxy-1,5-bis(aryl)imidazolidine-2,4-diones, synthesis and structure / V. G. Shtamburg, V. V. Shtamburg, A. A. Anishchenko, A. V. Mazepa, E. B. Rusanov // Journal of Molecular Structure. – 2022. – Vol. 1264. – P. 133259. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2022.133259

Pylypenko, O. O. Tautomeric behavior of 1,2,4-triazole derivatives: combined spectroscopic and theoretical study / O. O. Pylypenko, S. I. Okovytyy, L. K. Sviatenko, E. O. Voronkov, K. P. Shabelnyk, S. I. Kovalenko // Structural Chemistry. – 2022. – Vol. 33. – P. https://doi.org/10.1007/s11224-022-02057-0

Palchykov, V. 2-Amino-4,6,7,8-tetrahydrothiopyrano[3,2-b]pyran-3-carbonitrile 5,5-dioxide VP-4535 as an antimicrobial agent selective toward methicillin-resistant Staphylococcus aureus / V. Palchykov, N. Manko, N. Finiuk, N. Pokhodylo // Ukr. Biochem. J. – 2022. – Vol. 94, № 1. – P. 64–74. https://doi.org/10.15407/ubj94.01.064

lchykov, V. Synthesis of novel cage amides and imides and evaluation of their antibacterial and antigungal activities / V. Palchykov, A. Gaponov, N. Manko, N. Finiuk, O. Novikevych, O. Gromyko, R. Stoika, N. Pokhodylo // Ukr. Biochem. J. – 2022. – Vol. 94, № 3. – P. 24– 36. https://doi.org/10.15407/ubj94.03.024

Shtemenko, N. I. New formulation and activity of rhenium-platinum antitumor system / N. I. Shtemenko, D. E. Kytova, O. V. Berzenina, O. I. Hrabovska, A. V. Shtemenko // Ukr. Biochem. J. – 2022. – Vol. 94, № 3. – P. 92–98 https://doi.org/10.15407/ubj94.03.092

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Оковитий Сергій Іванович
д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Аніщенко Андрій Олександрович
(к. х. н., 02.00.03)

Борисенко Ірина Олександрівна

Гапонов Олександр Олексійович
(к. х. н., 02.00.03)

Коптєва Світлана Дмитрівна
(к. х. н., 02.00.03)

Оковитий Сергій Іванович
(д. х. н., 02.00.03)

Пальчиков Віталій Олександрович
(д. х. н., 02.00.03)

Стець Надія Вікторівна
(к. х. н., 02.00.04)

Штеменко Наталія Іванівна
(д. б. н., 03.00.04)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Терзі Н. В.

Телефон — +38 (097) 499-46-87

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

