

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U033344

Державний реєстраційний номер: 0124U000205

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Формування і верифікація баз даних по функціональним властивостям різноманітних наночастинок. Генерація початкових навчальних і тестових наборів. Розрахунок дескрипторів.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього 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, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

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)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1056.210

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

QSAR/QSPR моделювання різноманітних наночастинок для позаекспериментального скринінгу їхніх функціональних властивостей

Назва роботи англійською:

QSAR/QSPR modeling of various nanoparticles for extra-experimental screening of their functional properties

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: наночастинки металів, оксидів металів, у тому числі складні наночастинки з неорганічним ядром та органічною оболонкою. Досліджувані властивості наночастинок: π -потенціал, ліпофільність, цитотоксичність, тощо. Мета роботи: розробка моделей QSAR/QSPR для позаекспериментального скринінгу функціональних властивостей наночастинок та імплементація цих моделей у вигляді експертної системи. Для досягнення мети буде проведено формування і верифікацію баз даних по функціональним властивостям (π -потенціал, ліпофільність, цитотоксичність тощо) різноманітних наночастинок. На першому етапі роботи: на основі аналізу різних літературних джерел зібрано базу даних хімічних сполук, яка включає структурну та експериментальну інформацію щодо 742 наносполук, що представляють різні класи наноматеріалів. Дані охоплюють наночастинки різних матеріалів, зокрема металів (Ag, Pd, Pt, Au), nanoоксидів металів, органічних сполук, фулерени, а також нанотехнологічні структури, такі як ДНК-орігами та дендримери. База даних містить експериментальні дані щодо поведінки наночастинок у біологічних системах та їх фізико-хімічні властивості. Основні експериментальні параметри, що доступні в базі: 1) для клітин легеневої аденокарциноми (A549) а) взаємодія з клітинами; б) захоплення клітинами; в) вироблення активних форм кисню (ROS) у клітинах; 2) для ембріональних ниркових клітин людини (HEK293) а) захоплення клітинами; б) вироблення активних форм кисню (ROS) у клітинах; 3) π - потенціал а) у воді; б) у фосфатному буферному розчині (PBS); в) у сироватці; 4) індукція аутофагії (кількість зелених флуоресцентних точок на клітину); 5) життєздатність клітин; 6) LogP; 7) метаболічна активність ферменту CYP3A4 у печінці; 8) згасання внутрішньої флуоресценції AchE; 9) зв'язування PFOS (при pH=6 та 11); 10) кількість адсорбованого білка; 11) інгібування AchE. Для всіх сполук проведено молекулярне моделювання та розрахунки структурних дескрипторів для подальшого QSPR моделювання.

Реферат англійською:

Research Object: Metal nanoparticles, metal oxides, including complex nanoparticles with inorganic cores and organic shells. The studied properties of nanoparticles include π -potential, lipophilicity, cytotoxicity etc. Research Goal: The development of QSAR/QSPR models for experimental-free screening of the functional properties of nanoparticles and the implementation of these models as an expert system. To achieve this goal, databases on functional properties (π -potential, lipophilicity, cytotoxicity, etc.) of various nanoparticles will be compiled and verified. First Stage of the Work: Based on an analysis of various literature sources a database of chemical compounds was created, encompassing structural and experimental information for 742 nanocompounds representing different classes of nanomaterials. The data include nanoparticles of various materials, such as metals (Ag, Pd, Pt, Au), metal oxides, organic compounds, fullerenes, and nanotechnological structures like DNA origami and dendrimers. The database contains experimental data on the behavior of nanoparticles in biological systems and their physicochemical properties. The main experimental parameters available in the database include: 1. For lung adenocarcinoma cells (A549) a) Interaction with cells; b) Cellular uptake; c) Reactive oxygen species (ROS) production in cells. 2. For human embryonic kidney cells (HEK293) a) Cellular uptake; b) ROS production in cells. 3. π -potential a) In water; b) In phosphate-buffered saline (PBS); c) In serum. 4. Autophagy induction: Number of green fluorescent spots per cell. 5. Cell viability. 6. LogP (water-octanol partition coefficient). 7. Metabolic activity of the CYP3A4 enzyme in the liver. 8. Quenching of intrinsic fluorescence of AchE. 9. Binding of PFOS (at pH=6 and

pH=11). 10. Amount of adsorbed protein. 11. AchE inhibition. Molecular modeling and calculations of structural descriptors were performed for all compounds to enable further QSPR modeling.

Індекс УДК: 54:51Ф7;54:007, 544.165:54.31:004.94

Коди тематичних рубрик: 31.01.77

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кузьмін Віктор Євгенович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор, академік НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: База даних функціональних властивостей різноманітних наночастинок: ψ -потенціал, ліпофільність, цитотоксичність тощо.

Назва НТП англійською: A database of functional properties of various nanoparticles: ψ -potential, lipophilicity, cytotoxicity, etc.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, Програмні продукти

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі аналізу різних літературних джерел зібрано базу даних хімічних сполук, яка включає структурну та експериментальну інформацію щодо 742 наносполук. База даних містить експериментальні дані щодо поведінки наночастинок у біологічних системах та їх фізико-хімічні властивості. Основні експериментальні параметри, що доступні в базі: 1) для клітин легеневої аденокарциноми (A549) а) взаємодія з клітинами; б) захоплення клітинами; в) вироблення активних форм кисню (ROS) у клітинах; 2) для ембріональних ниркових клітин людини (HEK293) а) захоплення клітинами; б) вироблення активних форм кисню (ROS) у клітинах; 3) ψ - потенціал а) у воді; б) у фосфатному буферному розчині (PBS); в) у сироватці; 4) індукція аутофагії (кількість зелених флуоресцентних точок на клітину); 5) життєздатність клітин; 6) LogP; 7) метаболічна активність ферменту CYP3A4; 8) згасання внутрішньої флуоресценції AchE; 9) зв'язування PFOS (при pH=6 та 11); 10) кількість адсорбованого білка; 11) інгібування AchE.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення автоматизації виробничих процесів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Фахівці в галузі створення обладнання хіміко-технологічних процесів.

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

Стельмах С. І., Кузьмін В. Є., Огніченко Л. М. QSPR моделі для прогнозу дзета-потенціалів наночастинок оксидів. Вісник ОНУ. 2021. Том 26, № 2(78), С. 89–100.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

Д. х. н.

Перелік осіб-виконавців

Іллюшко Наталія Олександрівна

Артеменко Анатолій Григорович

(к. х. н., 02.00.03)

Кічова Марія Євгенівна

Огніченко Людмила Миколаївна

(к. х. н.)

Стельмах Сергій Ігорович

Хромов Олександр Іванович

**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**

