Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U001246

Державний реєстраційний номер: 0115U000483

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-03-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: СТРУКТУРНО-ЕЛЕКТРОННІ ОСНОВИ ПРОГНОЗУВАННЯ ВЛАСТИВОСТЕЙ МОЛЕКУЛЯРНИХ ТА ІОН-МОЛЕКУЛЯРНИХ КОМПЛЕКСІВ

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (057)705 12 47, 705 12 48

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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 107.59

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Концептуальні засади прогнозування функціональних властивостей іон-молекулярних систем та молекулярних комплексів

Назва роботи англійською:

Conceptual Foundations prediction of functional properties of ion-molecular systems and molecular complexes

Реферат українською:

Об'єкти дослідження - суміші іонних рідин та молекулярних розчинників, розчини 1-1 електролітів у ПК, ?-БЛ та сумішах ПК з 1,2-ДМЕ, модель молекули ацетонітрилу, кіназа глікогенсинтаза 3. Предмет дослідження - природа та інтенсивність міжчастинкових взаємодій в ІМС та ІР, піко- та нанорозмірні явища, що визначають функціональність досліджуваних ІР та ІМС (іонна та молекулярна асоціація, іонна сольватація, трансляційна дифузія, електронна структура та терапевтична (антималярійна) активність азотовмісних гетерциклічних сполук. Мета роботи - одержання надійної та детальної інформації з мікроскопічної структури, іонної та молекулярної динаміки та потенціалів міжчастинкових взаємодій в рідких неводних іон-молекулярних системах, пошук моделей кількісних співвідношень "просторова структура - активність"; пошук ефективних інгібіторів кінази глікогенсинтази. Методи дослідження - кондуктометрія, ЯМР спектроскопія, МД моделювання, ab initio МД моделювання, віртуальний скринінг, молекулярний докінг. Одержані експериментальні дані по молярним та граничним молярним електричним провідностям 1-1 електролітів та однозарядних іонів у ПК, ?-БЛ та сумішах ПК з 1,2-ДМЕ. Вперше проведено поділ на іонні складові в розчинах 1-1 електролітів в ПК, ?-БЛ та сумішах ПК з 1,2-ДМЕ в широкому інтервалі температур. Досліджено суміші BmimBF4, BmimPF6, BmimTfO, та BmimTFSI з АН, ?-БЛ і ПК методом ЯМР дифузометрії при 300 К. Встановлено, що коефіцієнти дифузії частинок зменшуються при збільшенні вмісту ІР приблизно за експоненційним законом. Із застосуванням методів ab initio MD моделювання, квантово-хімічних розрахунків та емпіричної параметризації розроблено нову модель молекули ацетонітрилу для МД моделювання. Нову модель було перевірено, шляхом порівняння обчислених та експериментальних властивостей чистого ацетонітрилу в температурному діапазоні 228.15-348.15 К. Метою даного дослідження були дизайн і комп'ютерний пошук молекул, здатних пригнічувати GSK-3. В роботі розглянуто конкурентне інгібування та запропоновано молекули, здатні діяти за цим механізмом. Для конкурентних інгібіторів створена система віртуального скринінгу, що заснована на структурах ферменту і відомих інгібіторів і дозволяє отримувати статистично достовірні результати. На основі великих серій інгібіторів побудовані моделі кількісних співвідношень "просторова структура - активність" (QSAR), що дозволяють передбачати величину інгібуючої активності для їх нових аналогів.

Реферат англійською:

Objects of investigation: mixtures of ionic liquids with molecular solvents, solutions of 1-1 electrolytes in PC, ?-BL and mixtures of PC with 1,2-DME, model of acetonitrile molecule for MD simulations, glycogen synthase kinase 3. The aim of this work is to obtain detailed and reliable information on the microscopic structure, ions and molecular dynamics and interparticle interactions in nonaqueous ion-molecular systems and ionic liquids; searching for models of quantitative relationships "spatial structure - activity" and searching for effective inhibitors of glycogen synthase kinase. Methods of investigation: conductometry, NMR, MD simulation, ab initio MD simulation, virtual screening, molecular docking. Experimental data on limiting molar conductance of 1-1 electrolytes in PC, ?-BL and mixtures of PC with 1,2-DME presented as well as limiting conductance of single ions in wide temperature range. Mixtures of ionic liquids BmimBF4, BmimPF6, BmimTfO, and BmimTFSI with AN, ?-BL, and PC were investigated with 1H-NMR diffusometry method at 300 K. Diffusion coefficients exponentially decrease with increasing RTIL mole fraction. A new potential (force field) model for acetonitrile molecule was

developed on the basis of quantum chemical calculations, ab initio molecular dynamics simulations and empirical parameterization. The developed potential model was tested for its ability to reproduce the experimental properties of neat acetonitrile in the range of temperatures between 228.15 and 348.15 K. The purpose of this investigation was design and computer search for molecules that can suppress GSK-3. The work considers competitive inhibition and suggests molecules that can act on this mechanism. For competitive inhibitors, a virtual screening system based on enzyme structures and known inhibitors has been developed and allows to obtain statistically reliable results. On the basis of large series of inhibitors models of quantitative relationships "spatial structure-activity" (QSAR) were constructed, which allow predicting the amount of inhibitory activity for their new analogues.

Індекс УДК: 541.1:001.18, 541.8

Коди тематичних рубрик: 31.15.01.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Вьюник Іван Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Дизайн і комп'ютерний пошук молекул, здатних пригнічувати GSK-3.

Назва НТП англійською: The purpose of this investigation was design and computer search for molecules that can suppress GSK-3.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В роботі розглянуто конкурентне інгібування та запропоновано молекули, здатні діяти за цим механізмом. Для конкурентних інгібіторів створена система віртуального скринінгу, що заснована на структурах ферменту і відомих інгібіторів і дозволяє отримувати статистично достовірні результати.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2016-2019 рр

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ВНЗ України

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

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Катрич Віктор Олександрович

Перелік осіб-виконавців

Батрак А.

Вовчинський І.

Вьюник І

Калугін О.

Коверга В.

Колесник Я.

Корсун О.

Кравченко А.

Мереха Б.

Новіков Д.

Нікітіна А.

Рябчунова А.

Ткаченко В.

Філатов Я.

Черножук Т.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності