

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U005283

Державний реєстраційний номер: 0110U000375

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-12-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Біоактивність органічних сполук в модельних системах

Початок етапу: 01.2014

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітнього документа: Остаточний 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

Код за ЄДРПОУ: 02033333

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (044) 234-32-43

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.): 570.7
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пошук і модельні дослідження потенційно біоактивних сполук

Назва роботи англійською:

Search and model researches of potentially bioactive compounds

Реферат українською:

Вивчено вплив похідних фосфонових кислот на макроциклічній платформі тіакаліксаренів на активність протеїнтирозинфосфатаз. Нові гетероциклічні сполуки були запропоновані як можливі антиоксиданти. Було встановлено, що комбінація оціночних функцій AutoDock і AutoDock Vina приводить до нової покращеної гібридної функції для молекулярного докінгу і прогнозування біоактивності.

Реферат англійською:

The effects of phosphonic acid derivatives on a macrocyclic platform of thiacalixarenes on protein tyrosine phosphatase activities were investigated. New heterocyclic compounds as possible antioxidants were proposed. It was established that combination of scoring functions of AutoDock and AutoDock Vina provides a new, improved hybrid scoring function for molecular docking and bioactivity prediction.

Індекс УДК: 547.9;577.1.01, 577.1

Коди тематичних рубрик: 31.23.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Вовк Андрій Іванович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові знання про біоактивність органічних сполук в модельних системах

Назва НТП англійською: New knowledges of bioactivities of organic compounds in model systems

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: біоорганічна хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Вивчено вплив похідних фосфонових кислот на макроциклічній платформі тіакаліксаренів на активність протеїнтірозинфосфатаз. Нові гетероциклічні сполуки були запропоновані як можливі антиоксиданти. Було встановлено, що комбінація оціночних функцій AutoDock і AutoDock Vina приводить до нової покращеної гібридної функції для молекулярного докінгу і прогнозування біоактивності.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначаються НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Наукові організації(органічна хімія, біоорганічна хімія, біохімія)

Перспективні ринки: Україна, зарубіжні країни

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

Перелік осіб-виконавців

І.М. Міщенко

В.Ю. Танчук

Л.А. Кононець

О.В. Музичка

О.В. Суховеев

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

