

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U008144

Державний реєстраційний номер: 0114U003042

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розрахункове та експериментальне дослідження специфічності дії сполук на ферменти-мішені.

Початок етапу: 01.2015

Закінчення етапу: 12.2015

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

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.): 1226

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Комп'ютерний дизайн нових біоактивних сполук та дослідження зв'язку структура-активність

Назва роботи англійською:

Computer design of new bioactive compounds and studying of the relationships between the structure and activity.

Реферат українською:

Методами ШНМ та k-NN побудовано QSAR моделі для передбачення антимікробної активності іонних рідин на основі імідазолію із широким колом різновидів аніонів та ряду похідних тіазолу. Експертні системи, розроблені на основі аналізу досліджених сполук як інгібіторів мікробного росту, є ефективним засобом для відбору потенційно активних біорегуляторів із певною хімічною будовою і можуть успішно використовуватися для розрахункового скринінгу при конструюванні на їх основі біорегуляторів для потреб медико-біологічної та фізичної хімії у виробничих та науково-дослідних розробках.

Реферат англійською:

QSAR models for a prediction of antimicrobial activity of ionic imidazolium liquids with different types of anions and of the thiazol derivatives by the ASNN and k-NN methods were created. The developed expert systems on the basis of the analysis of the studied connections as inhibitors of microbial growth represent the effective tool for selection of potentially active bioregulators with a certain chemical structure and can be successfully used for settlement screening when designing of new bioregulators for needs of medicobiological and physical chemistry in production and research development.

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: Експертні системи, створені для прогнозування антимікробної активності іонних рідин із катіоном імідазолію та похідних тiazолу як інструмент у конструюванні нових ефективних біорегуляторів з відповідним молекулярним механізмом дії.

Назва НТП англійською: The expert systems created for preicting of antimicrobial activity of imidazolium ionic liquids and derivatives of thiazol as the instrument for the designing the new effective bioregulators with the corresponding molecular action mechanism.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: медицина, фармакологія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Отримані високі результати комп'ютерного прогнозування біологічної активності та експериментальні біологічні дослідження низькомолекулярних органічних сполук дозволили окреслити коло двох типів потенційних біорегуляторів як високо ефективних антимікробних агентів для подальшого вивчення механізмів їх дії.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначаються НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НДІ та учб.закл. фундам.та прикл.проф.досл-нь в обл.орг.синтезу, екології і біотехнол.

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

Перелік осіб-виконавців

І.В.Семенюта

І.М.Коперник

В.В.Ковалішин

В.М.Благодатний

Л.Є.Калашнікова

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

