Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000683

Державний реєстраційний номер: 0117U004134

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Синтез прогнозованих структур потенційних лігандів альфаIIbбета3. Вивчання антиагрегаційної активності та афінітету до альфаIIbбета3. Використання процедури "feature net" для побудови комплексних QSAR моделей. Аналіз факторів, що обумовлюють зв'язок структури з активністю та афінітетом. Для усіх кінцевих QSAR моделей буде проведено структурну та фізико-хімічну інтерпретацію. Дослідження активності, узагальнення результатів, аналіз зв'язку "структура-властивості-молекулярний механізм дії", формування висновків та підготовка звіту.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Остаточний 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, 01061, 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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1255.578

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез, структура, властивості та молекулярні механізми дії нових антитромботичних і противірусних засобів.

Назва роботи англійською:

Synthesis, structure, properties and molecular mechanisms of action of new antithrombotic and antiviral agents.

Реферат українською:

Робота присвячена синтезу та вивченню біологічної активності нових антагоністів до «закритої форми» фібриногенових рецепторів, потенційних противірусних агентів, індукторів інтерферону, лігандів ДНК та протизапальних агентів. дослідженню впливу структури на біологічні властивості. Здійснено направлений синтез похідних 2-(гомопіперазин-1-іл)хіназолін-4-ону. Показано, що похідні 2,6-заміщених хіназолін-4-ону інгібують зв'язування фібриногену з □IIb□3 та вивчено їхні антиагрегаційні властивості. Методом молекулярного докінгу встановлено основні центри зв'язування похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну до □IIb□3. Синтезовані 9-R-6-H-індоло[3,2-b]хіноксаліни, виходячи з заміщених ізатинів а також водорозчинні аналоги. Конденсацією 6-незаміщеного та 6-бромонафталевого ангідриду із амоніаком, гідразингідратом та гідроксиламіном, синтезували відповідні похідні нафталіміду. Конденсацією нінгідрину із заміщеними 1,2-диамінобензенами синтезовані нові похідні інденохіноксаліну, з останніх – відповідні оксими. Конденсацією ізатину із ізатовим ангідридом отримані тритантрини, а з них – відповідні оксими. Показано, що інденохіноксалінони є інтеркаляторами ДНК. Інденохіноксаліни, індоло[2,1-b]хіназолін-6,12-діони та їхні оксими досліджені на здатність інгібувати індуковану продукцію прозапальних цитокінів та інгібувати розвиток набряку, викликаного карагінаном. Виявлені активні in vitro в мікромолярних концентраціях та активні in vivo в дозі 34 мкмоль/кг сполуки. Застосовано процедуру GTM для формування та дослідження хімічного простору різноманітних антивірусних агентів. В результаті побудовано двомірні мапи, на яких вдається виділити компактні зони хімічного простору, пов'язані з різноманітними антивірусними агентами відносно вірусів різних таксономічних груп (Enterovirus, Hepacivirus, Orthomyxoviridae, Lentivirus, Orthohepadnavirus, Pestivirus, Herpesvirus).

Реферат англійською:

The work is devoted to the synthesis and study of the biological activity of new antagonists to the "closed form" of fibrinogen receptors, potential antiviral agents, interferon inducers, DNA ligands and anti-inflammatory agents. study of the influence of structure on biological properties. Directed synthesis of 2- (homopiperazin-1-yl) quinazolin-4-one derivatives was performed. Derivatives of 2,6-substituted quinazolin-4-one have been shown to inhibit fibrinogen binding to □IIb□3 and their antiplatelet properties have been studied. The main centers of binding of 2- (piperazin-1-yl) quinazoline derivatives to □IIb□3 were established by the method of molecular docking. Synthesized 9-R-6-H-indolo [3,2-b] quinoxalines, based on substituted isatins and water-soluble analogues. By condensation of 6-unsubstituted and 6-bromonaphthalic anhydride with ammonia, hydrazine hydrate and hydroxylamine, the corresponding naphthalimide derivatives were synthesized. Condensation of ninhydrin with substituted 1,2-diaminobenzenes synthesized new derivatives of indenoquinoxaline, from the latter - the corresponding oximes. Condensation of isatin with isate anhydride yields tritantrins and corresponding oximes. Indenoquinoxalinones have been shown to be DNA intercalators. Indenoquinoxalines, indolo [2,1-b] quinazoline-6,12-diones and their oximes have been studied for their ability to inhibit the induced production of pro-inflammatory cytokines and to inhibit the development of carrageenan-induced edema. Active in vitro at micromolar concentrations and active in vivo at a dose of 34 μmol/kg of compound were detected. The GTM procedure was used to form and study the chemical space of various antiviral agents. As a result, two-dimensional maps have been constructed, on which compact zones of chemical space associated with various antiviral agents

against viruses of different taxonomic groups (Enterovirus, Hepacivirus, Orthomyxoviridae, Lentivirus, Orthohepadnavirus, Pestivirus, Herpesvir

Індекс УДК: 547.8, 547.891.2: 547.785.5: 547.621: 615.217: 577.32.17.012: 543.422.25:

Коди тематичних рубрик: 31.21.27.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Андронаті Сергій Андрійович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові похідні 6- та 7-діалкіламінометиліненохіноксалінонів та 8-, 9- та 10-діалкіламінометиліндолохіноксалінів.

Назва НТП англійською: New derivatives of 6- and 7-dialkylaminomethyldeninoquinoxalinones and 8-, 9- and 10-dialkylaminomethyldinoloquinoxalines

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: З метою створення потенційних противірусних засобів синтезовано ряд похідних 6- та 7-діалкіламінометиліненохіноксалінонів та 8-, 9- та 10-діалкіламінометиліндолохіноксалінів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Споживачі продукції: Фармацевтичні підприємства., Вищі навчальні заклади.

Перспективні ринки: Україна

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:

Назва НТП українською: Інгібітори агрегації тромбоцитів на основі 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну.

Назва НТП англійською: Platelet aggregation inhibitors based on 2- (piperazin-1-yl) quinazoline.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування:Медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: З метою створення потенційних антиагрегаційних сполук - антагоністів до «закритої форми» фібриногенових рецепторів синтезовано ряд похідних 2-(піперазин-1-іл)хіназоліну.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Споживачі продукції: Фармацевтичні підприємства., Вищі навчальні заклади.

Перспективні ринки: Україна

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

1. Корнилов О.Ю., Крисько А.А., Крисько О.Л., Самбурський С.Е., Андронаті С.А. Новий метод отримання 6-нітро-2-(4-Вос-піперазин-1-іл)-3Н-хіназолін-4-ону. Вісн. Одеського нац. ун-ту. Сер. хімія. – 2017. – Т. 22, вип. 4(64). – С. 29 – 36. (https://doi.org/10.18524/2304-0947.2017.4(64).115919)

2. Klimenko K., Lyakhov S., Shibinskaya M., Karpenko A., Marcou G., Horvath D., Zenkova M., Goncharova E., Amirkhanov R., Krysko A., Andronati S., Levandovskiy I., Polishchuk P., Kuz'min V., Varnek A. Virtual screening, synthesis and biological evaluation of DNA intercalating antiviral agents. Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters 2017.- Vol. 27, № 16.- P 3915 – 3919 (https://doi.org/10.1016/j.bmcl.2017.06.035)

3. Карпенко О.С., Бойко О.О., Шибінська М.О., Кутузова Н.А., Ляхов С.А. Синтез та афінітет до ДНК 1-діалкіламіно-3- індоло[2,3-b]хіноксалін-6-ілпропан-2-олів. Вісник Одеського нац. ун-ту. Сер. хімія. - 2018. - Т. 23. – вип. 3. - С. 40-49. (https://doi.org/10.18524/2304-0947.2018.3(67).140799)

4. Андронаті С.А., Корнилов О.Ю., Поліщук П.Г., Крисько А.А., Крисько О.Л., Кабанова Т.А., Самбурський С.Е. Синтез та антиагрегаційна активність антагоніста □IIb□3 рецепторів на основі 2-(4-піперазин-1-іл)-3Н-хіназолін-4-ону. Доповіді НАН України. – 2019.- № 9. - С. 60 - 67. (https://doi.org/10.15407/dopovidi2019.09.060)

5. Schepetkin I.A., Khlebnikov A.I., Shibinskaya M.O., Karpenko O.S., Levandovskiy I.A., Kirpotina L.N., Quinn M.T. Synthesis, anticancer activity, and molecular modeling of 1,4-naphthoquinones that inhibit MKK7 and Cdc25. European Journal of Medicinal Chemistry.- 2019.□ Vol. 183, № 16.□ P 3915 – 3919. (https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2019.111719)

6. Zanoza S.O., Klimenko K., Maltzev G.V., Bykova T.I., Levandovskiy I.A., Lyakhov S.A., Andronati S.A., Bondarev M.L. Aminoalkoxyfluorenones and aminoalkoxybiphenyls: DNA binding modes. Bioorganic Chemistry.- 2019, volume 86, pages 52-60. (https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2019.01.024)

7. Schepetkin I.A., Khlebnikov A.I., Potapov A.S., Kovrizhina A.R., Matveevskaya V.V., Belyanin M.L., Atochin D.N., Zanoza S.O., Gaidarzhy N.M., Lyakhov S.A., Kirpotina L.N., Quinn M.T. Synthesis, biological evaluation, and molecular modeling of 11H-indeno[1,2-b]quinoxalin-11-one derivatives and tryptanthrin-6-oxime as c-Jun N-terminal kinase inhibitors. European Journal of Medicinal Chemistry.- 2019, volume 161, pp. 179-191. (https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.10.023)

8. Дума Г.І., Сазонов К.Д., Ляхов Л.С., Топоров С.В., Ляхов С.А. 6- та 7-Аміометил-11h-індено[2,3-b]хіноксалін-11-они – синтез, афінітет до ДНК та токсичність.Вісн. Одеського нац. ун-ту. Сер. Хімія. - 2020. - Том 25, № 1(73). - С. 65-76. (https://doi.org/10.18524/2304-0947.2020.1(73).198316)

9. Бліненко О.М., Косюк М.І., Карпенко О.С., Нестеркіна М.В., Кравченко І.А. Синтез, аналіз і розділення ізомерних інденота індолохіноксалінів. Вісник Одеського Національного університету. Сер. Хімія.– 2020. – Т. 25, № 4(76) – С. 89 – 97.

10. Корнилов О.Ю., Кабанова Т.А., Халімова О.І., Крисько О.Л., Самбурський С.Е., Андронаті С.А., Крисько А.А. Синтез та анальгетична активність похідних 6-аміно-2-піперазинілхіназолінів// Вісник Одеського Національного університету. Сер. Хімія. – 2021. – Т. 26, № 1(77). – С. 74-84. (https://doi.org/10.18524/2304-0947.2021.1(77).226140)

11. Liakhov S.A., Schepetkin I.A., Karpenko O.S., Duma H.I., Haidarzhy N.M., Kirpotina L.N., Kovrizhina A.R., Khlebnikov A.I., Bagryanskaya I.Y., Quinn M.T. Novel c-Jun N-terminal Kinase (JNK) Inhibitors with an 11H-Indeno[1,2-b]quinoxalin-11-one Scaffold // Molecules.-2021.- Vol.26.- №18.- 5688 (https://doi.org/10.3390/molecules26185688)

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Кузьмін Віктор Євгенович
д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Іллюшко Наталія Олександрівна

Андронаті Сергій Андрійович
(д.х.н., 02.00.03)

Карпенко Олександр Сергійович
(к. х. н.)

Корнілов Олександр Юрійович

Крисько Андрій Арнольдович
(к. х. н.)

Крисько Ольга Леонтіївна
(к. б. н.)

Кузьмін Віктор Євгенович
(д. х. н.)

Михайлова Тетяна Вікторівна
(к. х. н.)

Шибінська Марина Олегівна
(к. х. н.)

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

