

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U005187

Державний реєстраційний номер: 0109U007123

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-07-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вивчення літературних даних, створення вибірки сполук, квантово-хімічні розрахунки та ЕТМ-ШНМ аналіз фізіологічної активності сполук

Початок етапу: 04.2009

Закінчення етапу: 12.2009

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): Державне агентство з питань науки, інновацій та інформатизації України

Код за ЄДРПОУ: 37200303

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 246-39-10

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.): 25

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Експертна система для передбачення активності сполук, що взаємодіють з цитохромом Р450

Назва роботи англійською:

Predictive expert system for compound-P450 cytochrome interactions.

Реферат українською:

Створення комп'ютерної експертної системи на основі електронно - топологічного методу (ЕТМ) та методу штучних нейронних мереж (ШНМ) для використання в токсикологічних дослідженнях. Створена експертна система дозволить проводити кількісну та якісну оцінку молекул відносно їх здібності виступати інгібіторами чи активаторами СYP (цитохрому) 450. На основі літературних даних та даних фармацевтичної індустрії буде створена база даних сполук, які необхідні для побудови комп'ютерних моделей. Будуть створені індивідуальні моделі для різних ізоферментів СYP450, а саме 1A2, 2C9, 2C19, 2D6, 3A4, які представляють більш ніж 60% загальних СYPs, що знаходяться в організмі (печінці) людини.

Реферат англійською:

The current research project will focuses on creation of predictive toxicity-based expert system on the base Electronic-Topological Method (ETM) and artificial neural networks (ANNs). The predictive expert system will provide qualitative and quantitative assessment of molecules with respect to their ability to inhibit or activate CYP 450. The data required to build the model, will be collected from the literature and/or received from Pharma industry (under negotiation). We will develop individual models for several isoforms of CYP450, namely 1A2, 2C9, 2C19, 2D6, and 3A4, which account for more than 60% of the total hepatic CYPs.

Індекс УДК: 519.68

Коди тематичних рубрик: 27.47.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Ковалішин В.В

Науковий ступінь: к.х.н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерна експертна система для передбачення активності сполук

Назва НТП англійською: Expert system for compounds interactions.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: комп'ютерна хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі аналізу 1300 наукових робіт створено навчальну вибірку з більш як 5000 сполук здатних виступати інгібіторами чи активаторами різноманітних ізоферментів цитохрому Р450. Проведено квантово-хімічні розрахунки дескрипторів даних хімічних сполук та на їх основі створено комп'ютерні моделі за допомогою ЕТМ-ШНМ методу для різноманітних ізоферментів СYP450.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: визначається НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: фармацевтична індустрія

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

Кухар Валерій Павлович

Перелік осіб-виконавців

Ковалішин В.В.

Прокопенко В.В

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

