

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U000020

Державний реєстраційний номер: 0124U0000248

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка нових QSAR-моделей для прогнозування активності хінолонів як класу сполук гетероциклічної природи із широким спектром антимікробної активності. Експериментальні дослідження. Вивчення молекулярних механізмів антимікробної дії хінолонів проти антибіотико-резистентних бактеріальних штамів.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442960409, 380445732552

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, 01601, 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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2482.894

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

QSAR-прогнозування та експериментальне дослідження активності синтетичних низькомолекулярних сполук як нових мішень-орієнтованих біологічно активних агентів широкого спектру дії.

Назва роботи англійською:

QSAR-prediction and experimental study of the synthetic low-molecular-weight compounds activity as new target-oriented biologically active agents of a wide spectrum of action.

Реферат українською:

На основі розроблених класифікаційних та регресійних QSAR-моделей антибактеріальної активності похідних 2(4)-гідразонохінолінів ідентифіковано вісім похідних хіноліну як ефективних антибактеріальних агентів, що продемонстрували високий *in vitro* потенціал як проти стандартних бактеріальних культур *S. aureus* ATCC25923 і *E. coli* ATCC25922, так і проти відповідних антибіотико-резистентних внутрішньолікарняних ізолятів. На основі сформованої за літературними джерелами бази даних широкого спектру хімічних класів сполук щодо їх токсичного потенціалу для гідробіонта *D. magna* побудовано ряд QSTR-моделей для встановлення взаємозв'язку «структура-токсичність» щодо досліджених 2(4)-гідразонових похідних хіноліну з антибактеріальними властивостями. Порівняльний аналіз *in silico* та *in vivo* результатів досліджень токсичності досліджених хінолінів на моделі гідробіонта *D. magna* та *in silico* характеристики токсичності відомих препаратів дозволило класифікувати досліджені сполуки як низькотоксичні та підтвердити їх перспективність для вивчення та подальшого потенційного використання в галузі медицини, в тому числі як ефективних протимікробних засобів. Проведені розрахункові дослідження хінолінів методом докінг-аналізу дозволяють більш точно прогнозувати їх активність не тільки як потенційних антибактеріальних засобів, але й як мішень-орієнтованих інгібіторів бактеріальної дигідрофолатредуктази.

Реферат англійською:

Based on the developed classification and regression QSAR models of antibacterial activity of 2(4)-hydrazonoquinoline derivatives, eight quinoline derivatives were identified as effective antibacterials that demonstrated high *in vitro* potential both against standard bacterial cultures *S. aureus* ATCC25923 and *E. coli* ATCC25922, and against corresponding antibiotic-resistant hospital isolates. Based on the database of a wide range of compounds chemical classes with respect to their toxic potential for the aquatic organism *D. magna*, a number of QSTR models were developed to establish the structure-toxicity relationship for the studied 2(4)-hydrazonoquinoline derivatives with antibacterial properties. Comparative analysis of *in silico* and *in vivo* results of toxicity studies of the studied quinolines on the hydrobiont model *D. magna* and *in silico* toxicity characteristics of the known drugs allowed classifying the studied compounds as low-toxic and confirming their prospects for study and further potential use in the field of medicine, including as effective antimicrobial agents. The conducted computational studies of quinolines by the docking analysis method allow more accurately predicting their activity not only as potential antibacterial agents, but also as target-oriented inhibitors of bacterial dihydrofolate reductase.

Індекс УДК: 547.9;577.1, 615.9::574, 573.6;57.089:616-7

Коди тематичних рубрик: 31.23, 34.47.51, 34.57

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Метелиця Лариса Олексіївна

Науковий ступінь: д. б. н.

Вчене звання:професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові прогнозуючі моделі токсичності з високою стабільністю та прогностичною здатністю як ефективний *in silico* інструмент для попередньої оцінки токсичного потенціалу нових біологічно активних сполук.

Назва НТП англійською: New predictive toxicity models with high stability and predictive ability as an effective *in silico* tool for preliminary assessment of the toxic potential of new biologically active compounds.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Біологічна та фармацевтична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Побудовані в процесі виконання роботи нові прогнозуючі моделі антибактеріальної активності та токсичності похідних хіноліну на основі поєднання сучасних *in silico* методів хемоінформатики і біологічних *in vitro* та *in vivo* методів дослідження дозволило ідентифікувати ряд 2(4)-гідразонохінолінів як перспективних антибактеріальних агентів із позитивним профілем токсичності, а створені прогнозуючі моделі запропонувати для широкого кола науковців шляхом оприлюднення на OCHEM сервері.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення стану навколишнього середовища, 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: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Учбові заклади та виробничі лабораторії, що займаються пошуком та аналізом нових біологічно активних сполук.

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

1. Kovalishyn V.V., Hodyna D.M., Brazhko O.A., Metelytsia L.A. In silico and in vivo studies of acute toxicity of quinoline derivatives as antibacterials. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / за загальною ред. А.І. Вовка. Київ: Інтерсервіс, 2024. С. 104–109.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Броварець Володимир Сергійович
д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Броварець Людмила Сергіївна

Година Діана Миколаївна
(к.б.н., 02.00.10)

Дерев'янка Катерина Юріївна

Ковалішин Василь Володимирович
(к.х.н., 02.00.10)

Світлійша Інна Василівна

Світлійший Максим Миколайович

Семенюта Іван Володимирович
(к.б.н., 02.00.10)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бондаренко О.М.

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

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

