Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U004190

Державний реєстраційний номер: 0107U001300

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-01-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Узагальнення результатів, отриманих на попередніх етапах. Побудова моделі реалізації противірусної дії вивчених сполук. Розробка рекомендацій до цілеспрямованого синтезу противірусних та інтерфероногенних сполук на основі одержаних результатів.

Початок етапу: 01.2010

Закінчення етапу: 12.2011

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 НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 048 766-20-44: факс 048 765-96-02

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

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.): 2659.98

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Структурно-функціональні дослідження біологічно активних речовин, каталітичних систем та матеріалів для оптоелектроніки.

Назва роботи англійською:

Structure-functional research of biologically active substances, catalytical systems and materials for optical electronics

Реферат українською:

Синтезовано ряд 3-алкокси-1,2-дигідро-3Н-1,4-бенздіазепін-2-онів, які є селективними та високоафінними лігандами ЦБДР. Показано, що введення в третє положення похідних 1,4-бенздіазепін-2-онів 3-алкоксильних замісників приводить до отримання селективних високоафінних лігандів ЦБДР. Вперше отримано нове трициклічне похідне 1,2-дигідро-3Н-1,4-бенздіазепін-2-ону, анельоване по положенням 2,3,-7-бром-2 -N,N-діфеніламін-9-(2'-хлорфеніл)-10аН-[1,3]-тіазоло-[4,5b][1,4]-бенздіазепін.

Реферат англійською:

Novel 3-alkoxy-1,2-dihydro-3H-1,4-benzodiazepine-2-ones as selective the high affinitive ligands of CBR were synthesized. It was found that substitution by alkoxy group in the position 3 of 1,4-benzodiazepine-2-ones leads to selective and high affinitive ligands of CBR. It was obtained novel tricyclic derivative of 1,2-dihydro-3H-1,4-benzodiazepine-2-one fused by 2,3 positions, - 7-bromo-2-N,N-diphenylamine-9-(2'-chlorophenyl)-10aH-[1,3]-thiazolo-[4,5b][1,4]-benzodiazepine

Індекс УДК: 547.9;577.1, 547.891.2 + 615.217 +577.32'17.012:543.422.25 + 542.943 + 547.1:541.6

Коди тематичних рубрик: 31.23

Керівники роботи

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

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи синтезу селективних лігандів центральних і периферичних бенздіазепінових рецепторів ЦНС. QSAR моделі зв'язку структура-афінітет-селективність зв'язування лігандів з бенздіазепіновими рецепторами (БДР).

Назва НТП англійською: The methods of synthesis of selective ligands of central and peripheral benzodiazepine receptors of CNS were developed. QSAR models of structure-affinity-selectivity of ligand binding to benzodiazepine receptors (BDR).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі молекулярного дизайну і структурно-конформаційного вивчення потенційних лігандів центральних і периферичних бенздіазепінових рецепторів рецепторів ЦНС, синтезовано ряд селективних лігандів периферичних (Ki = від 17.0 до 50,0 nM), та центральних (Ki = від 1.05 до 10,0 nM) бенздіазепінових рецепторів ЦНС. Синтезовані нові RGD-міметикі, які містять фрагменті 1,2,3,4-тетрагідроізохіноліну та бета-(3,4-метилендіоксіфеніл)-бета-аланіну. У якості лінкеров застосовано фрагменти терефталевої, м-амінобензойної та 3,3-диметилглутарової кислот. Встановлено афінитет до фібриногенових рецепторів RGD-міметиків та антиагрегаційна активність у дослідах in vitro. Побудовані QSAR моделі зв'язку структура-аффінітет-селективність зв'язування лігандів з бенздиазепіновими рецепторами (БДР) були використані для подальшого скринінгу потенційних високоафінних і селективних лігандів БДР. За результатами інтерпретації QSAR моделей було виявлено, що наявність метоксікарбонілалкильної групи в положенні 1, є важливим фактор

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Фармацевтична промисловість, науково-навчальні заклади

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація:--

IX. Бібліографічний опис

Andronati Sergey, Semenishyna Ekaterina, Pavlovsky Victor, Simonov Yuriy, Makan Svetlana, Boyko Irina, Gdaniec Maria, Cardinael P., Bouillon Jean-Philippe Structure and Affinity of 3-alkoxy-1,2-dihydro-3H-1,4-benzodiazepine-2-ones for Central Benzodiazepine Receptors Europian Journal of Medical Chemistry- 2010. - Vol.45, № 4. - 1346-1351

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Єгорова Алла Володимирівна

Андронаті Сергій Андрійович

Головенко Микола Якович

Камалов Герберт Леонович

Карасьова Тамара Леонідівна

Коровін Юрій Вікторович

Кузьмін Віктор Євгенович

Мешкова Світлана Борисівна

Павловскький Віктор Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

