

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U106774

Державний реєстраційний номер: 0116U008925

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-12-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Стандартизація субстанцій та розробка лікарської форми гексафторосилікатів з біологічно-активними "онієвими" катіонами

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487233324, 380487233567, 380487178905

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487233324

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7704 - власні кошти, кошти підприємств, установ, організацій, фізичної особи на виконання ініціативних робіт

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 30.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пошук нових карієспротекторних агентів у ряді гексафторосилікатів із біологічно-активними "онієвими" катіонами

Назва роботи англійською:

The search for new caries preventive agents in a number of hexafluorosilicate with biologically active "onium" cations

Реферат українською:

Здійснено синтез амонієвих гексафторосилікатів (АГФС) з заміщеними катіонами 1,2,4-триазолію, піридинію, піримідинію, октенідину. Будову синтезованих АГФС встановлено за даними ІЧ-, ЯМР ¹H, ¹⁹F-спектроскопії та рентгеноструктурного аналізу. Визначено розчинність АГФС у воді, метанолі, етанолі (96 %) і диметилсульфоксиді. Тенденції в зміні розчинності солей у воді інтерпретовано в рамках побудованих 2D QSPR моделей. Встановлено, що карієспрофілактична ефективність (КПЕ) АГФС практично у всіх випадках перевищує аналогічні показники референс-препарату – натрію фториду. Виявлено сполуку-лідера, 4-карбоксиметилпіридинію гексафторосилікат, для якої значення КПЕ перевищує аналогічний показник NaF в 5 разів. Зроблено висновок, що за своїми характеристиками ця сполука може розглядатися як перспективний об'єкт подальших фармакологічних досліджень.

Реферат англійською:

The synthesis of ammonium hexafluorosilicates (AHFS) with substituted cations of 1,2,4-triazolium, pyridinium, pyrimidinium, octenidine has been carried out. The structure of the synthesized AHFS was established by IR-, ¹H, ¹⁹F NMR- spectroscopy and X-ray diffraction analysis. The solubility of AHFS in water, methanol, ethanol (96%) and dimethylsulfoxide was determined. Trends in changing the solubility of salts in water are interpreted in the framework of 2D QSPR models. It was found that the caries prophylactic efficacy (CPE) of AHFS in almost all cases exceeds similar indicators of the reference drug – sodium fluoride. A leader compound, 4-carboxymethylpyridinium hexafluorosilicate, was identified; for it the CPE value was 5 times higher than that for NaF. It is concluded that according to its characteristics, this compound can be considered as perspective object of further pharmacological research.

Індекс УДК: 615.31, 615.1:546.286: 616.314-002.4

Коди тематичних рубрик: 76.31.35

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Гельмбольдт Володимир Олегович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Пошук нових карієспротекторних агентів у ряді гексафторосилікатів із біологічно-активними "онієвими" катіонами

Назва НТП англійською: The search for new caries preventive agents in a number of hexafluorosilicate with biologically active "onium" cations

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології

Галузь застосування: медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Здійснено синтез нової сполуки – 3-гідроксиметилпіридинію гексафторосилікату моногідрату (I). За даними PCA, іонна структура I стабілізована Н-зв'язками $\text{OH}\cdots\text{O}$, $\text{NH}\cdots\text{F}$, $\text{OH}\cdots\text{F}$ та контактами $\text{CH}\cdots\text{F}$. Визначені значення розчинності солі I в воді, метанолі, етанолі (96 %) та диметилсульфоксиді. Розроблені адекватні 2D моделі QSPR для аналізу розчинності у воді амонієвих гексафторосилікатів. Модель M1 дозволяла досліджувати вплив різних фізико-хімічних та структурних факторів на розчинність у воді амонієвих гексафторосилікатів. Модель QSPR M2 могла з достатньою точністю передбачити розчинність нових сполук досліджуваного типу. Проведено віртуальний аналіз біологічної активності і ліпофільності комерційно доступних похідних піридину, що містять протизапальні фармакофори, як можливих кандидатів для синтезу антикарієсних агентів. За даними розрахунків, вивчені похідні піридину належать до малотоксичних "drug-like" сполук.

Соціально-економічна спрямованість НТП: 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:

Перспективні ринки:

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. Gelmboldt V.O., Anisimov V.Yu., Shyshkin I.O., Fonari M.S., Kravtsov V.Ch. Synthesis, crystal structures, properties and caries prevention efficiency of 2-, 3-, 4-carboxymethylpyridinium hexafluorosilicates // J. Fluorine Chem. – 2018. – V. 205, № 1. – P. 15-21.
2. Гельмбольдт В.О., Анісімов В.Ю. Амонієві гексафторосилікати: новий тип антикарієсних агентів // Фарм. журнал. – 2018. – № 5-6. – С. 48-69.
3. Gelmboldt V., Ognichenko L., Shyshkin I., Kuz'min V. QSPR models for water solubility of ammonium hexafluorosilicates: analysis of the effects of hydrogen bonds // Struct. Chem. – 2021. – V. 32, № 1. – P. 309-319.

X. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Запорожан Валерій Миколайович

д. мед. н.

Перелік осіб-виконавців

Анісімов Володимир Юрійович
(к.б.н.)

Гельмбольдт Володимир Олегович
(д.х.н.)

Литвинчук Ірина Вікторівна

Приступа Богдан Володимирович
(к.б.н.)

Рожковський Ярослав Володимирович
(д.мед.н.)

Улізко Ігор Віталійович

Шишкін Іван Олегович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Криштальова Надія Миколаївна

Телефон

+38 (097) 587-58-71

Реєстратор

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

