

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U001622

Державний реєстраційний номер: 0125U002891

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-01-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка методики дизайну анельованих похідних 1,4-бензодіазепіну, та скринінг бібліотек малих молекул.

Початок етапу: 07.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього документа: Проміжний 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, 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.): 129.965
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка наукових засад створення безпечних анксолітичних, протисудомних та анальгетичних агентів для лікування посттравматичного стресового розладу на основі анельованих азолопохідних 1,4-бензодіазепіну.

Назва роботи англійською:

Development of scientific principles for the creation of safe anxiolytic, anticonvulsant and analgesic agents for the treatment of post-traumatic stress disorder based on annelated azolo- derivatives of 1,4-benzodiazepine.

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: методи дизайну та скринінгу анельованих азолопохідних 1,4-бензодіазепіну як анксолітичних, протисудомних та анальгетичних агентів. Біологічно активні анельовані азолопохідні 1,4-бензодіазепіну
Мета роботи: Розробка методик дизайну, синтезу і біологічної оцінки анельованих азолопохідних 1,4-бензодіазепіну як безпечних анксіолітичних, протисудомних та анальгетичних агентів для лікування посттравматичного стресового розладу
На першому етапі роботи: на основі аналізу літературних джерел було обрано ряд анельованих триазолопохідних 1,4-бензодіазепіну із різними замісниками в положеннях 4- та 8-. На основі цього ряду було відпрацьовано метод комп'ютерного скринінгу із використанням молекулярного докінгу і створено базу даних їх чисельних значень афінитету до бензодіазепінового сайту зв'язування рецепторів ГАМКА людини та їх тривимірних позицій в сайті зв'язування та інформації, щодо їх взаємодії із амінокислотними залишками активного центру рецептора. Проведено аналіз взаємодій між молекулами ліганду та амінокислотними залишками рецептора. На основі отриманої інформації обрано ряд найперспективніших сполук для подальшого синтезу і дослідження біологічної активності, а саме 8-бромо 4-феніл, 4-бензил, 4-ариліден похідні 1-метил-6-феніл-4h-тріазоло[4,3-a][1,4]бензодіазепіну та їх можливі модифікації при заміщенні ароматичних ядер. Проведені пілотні біологічні дослідження для оцінки анксіолітичної, седативної та снодійної дії похідних бензодіазепіну на прикладі сполуки-порівняння – гідазепаму.

Реферат англійською:

Object of the research: design and screening methods for annelated azolo- derrivatives of 1,4-benzodiazepine as anxiolytic, anticonvulsant and analgesic agents. Bioactive annelated azolo- derrivatives of 1,4-benzodiazepine. The main goal of the project: the development of methods of the design, synthesis and biological evaluation of annelated azolo- derrivatives of 1,4-benzodiazepine as safe anxiolytic, anticonvulsant and analgesic agents for the treatment of post-traumatic stress disorder. On the first stage of the project: the series of annelated triazoloderrivatives of 1,4-benzodiazepine with a variety of substituents at positions 4- and 8- have been chosen based on the analysis of the literature sources. Computational screening of this series was carried out using molecular docking method. The database of affinity values to the benzodiazepine binding site of human GABAA receptor, the 3D poses in the binding site and the data on interactions with amino acid residues in the binding site was created. The analysis of the interactions between ligand molecules and amino acid residues in the binding site was carried out. The series of the most promising compounds (8-bromo 4-phenyl, 4-benzyl, 4-arylidene, derivatives of 1-methyl-6-phenyl-4H-triazolo[4,3-a][1,4]benzodiazepine) has been chosen for the subsequent research. The pilot biological screening of anxiolytic, sedative, and hypnotic activity for benzodiazepine derrivated using gidazepam as the comparison compound.

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.891.2:544.165:[615.212+615.214]

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:Стельмах Сергій Ігорович

Науковий ступінь: д.філософ

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: База даних чисельних значень афінитету до бензодіазепінового сайту зв'язування рецепторів ГАМКА людини, із тривимірних позицій в сайті зв'язування та інформації, щодо їх взаємодії із амінокислотними залишками активного центру рецептора.

Назва НТП англійською: The database of affinity values to the benzodiazepine binding site of human GABAA receptor, the 3D poses in the binding site and the data on interactions with amino acid residues in the binding site

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: Органічна хімія. Біоорганічна хімія. Фармацевтична хімія та фармакогнозія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Використання для позаекспериментального скринінгу похідних бензодіазепіну для вибору найперспективніших сполук для подальшого синтезу та вивчення біологічної активності. Для фахівців в галузі математичного моделювання, баз даних.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля: Не впливає

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 07.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: Фахівці в галузі математичного моделювання, баз даних.

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

д. х. н., 05.14.06

Перелік осіб-виконавців

Валіводзь Ірина Петрівна

(к. б. н., молодший науковий співробітник)

Златов Євген Владиславович

Стельмах Сергій Ігорович

(д.філософ)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Іллюшко Наталія Олександрівна

Телефон

+38(067)7243955

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна