

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U001050

Державний реєстраційний номер: 0117U000100

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-01-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Узагальнення та систематизація літературних даних про антимікробні властивості водорозчинних із аніонами хлору та броду та водо нерозчинних полімерних іонних рідин із аніоном тетрафторборатом – іоненів. Адаптування методів дослідження антимікробних властивостей для оцінки активності полімерних матеріалів. Експериментальні дослідження.

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітного 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 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): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

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.): 1484.06
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

QSAR моделювання та експериментальні дослідження властивостей нових потенційно біоактивних сполук.

Назва роботи англійською:

QSAR modeling and experimental studies of new bioactive compounds properties.

Реферат українською:

Методами *in silico* та *in vitro* ідентифіковано ряд тiazоловмісних похідних ізоніазиду як оригінальні протитуберкульозні об'єкти проти мультирезистентних штамів *Mycobacterium tuberculosis*. На основі розроблених QSAR моделей, відібрано та запропоновано ряд трифеніл-фосфонієвих солей оксазолу як потенційні дезінфектанти з високою антикандидозною активністю проти штамів мультирезистентних клінічних ізолятів гриба роду *Candida*. Раціональний дизайн серії сульфаніламідних похідних 1,3-оксазолу дозволив рекомендувати ряд сполук як перспективні кандидати для розробки нових протипухлинних агентів, інгібіторів тубуліну, із специфічним молекулярним механізмом дії проти широкого спектру ракових патологій.

Реферат англійською:

In silico and *in vitro*, a series of thiazole-derived isoniazid derivatives have been identified as original anti-TB agents against multi-resistant *Mycobacterium tuberculosis* strains. Based on the developed QSAR models, a number of triphenylphosphonic salts of oxazole were selected and proposed as potential disinfectants with high anti-candidiasis activity against strains of multiresistant clinical isolates of the *Candida* genus. The rational design of the series of sulfanilamide derivatives of 1,3-oxazole has allowed to recommend a number of compounds as promising candidates for the development of new antitumor agents, tubulin inhibitors, with a specific molecular mechanism of action against a wide range of cancer pathologies.⁵⁴⁸¹

Індекс УДК: 577.21:576.314;576.52;577.352, 577.21; 576.314; 577.352

Коди тематичних рубрик: 34.15.37

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: к.б.н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові тiazоловмісні похідні ізоніазиду як оригінальні об'єкти проти мультирезистентних штамів *Mycobacterium tuberculosis*; нові 3-феніл-фосфонієві соліоксазолу як потенційні дезінфектанти з високою антигрибковою активністю проти штамів мультирезистентних клінічних ізолятів гриба роду *Candida* та нові сульфаніламідні похідні 1,3-оксазолу як перспективні кандидати для розробки нових протипухлинних агентів, інгібіторів тубуліну, із специфічним молекулярним механізмом дії проти широкого спектру ракових патологій.

Назва НТП англійською: New thiazole derivatives of isoniazid as the original objects against multi-resistant strains of *Mycobacterium tuberculosis*; new 3-phenyl-phosphonium saloxazole as potential disinfectants with high antimycotic activity against strains of multiresistant clinical isolates of the *Candida* genus and new sulfanilamide derivatives of 1,3-oxazole as promising candidates for the development of new antitumor agents, tubulin inhibitors, with a specific molecular mechanism of action against a broad the spectrum of cancer pathologies.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методами *in silico* та *in vitro* ідентифіковано та запропоновано для подальшого вивчення серію нових похідних азолу як ефективні потенційні протитуберкульозні, антигрибкові та антиракові агенти із специфічним механізмом молекулярної дії. Створені у процесі роботи QSAR моделі біологічної активності широкого спектру похідних азолу мають високу прогнозуючу ефективність і можуть бути успішно використані в процесі конструювання нових біорегуляторів із відповідним типом дії.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначаються НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: НДЗ фундам.та прикладн.проф.д-ті в області органічн.синтезу, хімії природних сполук, екології та біотехнологій.

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

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

Перелік осіб-виконавців

І.В.Семенюта

В.В.Ковалішин

Д.М.Година

Л.Є.Калашнікова

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

