Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0210U001469

Державний реєстраційний номер: 0107U000659

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-02-2010

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Хемометричні засади досліджень залежностей структура-утримання-властивость

Початок етапу: 01.2009

Закінчення етапу: 12.2009

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 705 12 54, (057)7177-161

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 40.33

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Кількісні залежності структура-утримування-властивость біологічно активних речовин за даними мицелярної рідинної хроматографії

Назва роботи англійською:

Quantitative relationships structure-retention-property of biological-active substances by micellar liquid chromatography data

Реферат українською:

Отримати комплекс даних про утримування біологічно активних сполук в умовах міцелярної рідинної хроматографії (МРХ) і на цій основі побудувати адекватні мультипараметричні моделі для прогнозування біологічної активності нових сполук. Створити моделі для фізико-хімічного опису взаємодій у мікрогетерогенних рухомих фазах, що застосовуються в сучасних гібридних методах аналізу. Методи: спектрофотометрія, потенціометрія, МРХ, ВЕРХ, квантово-хімічні розрахунки, кластерний аналіз, аналіз головних компонент, хемометрика, тестові методи. Одержані результати та новизна: Методом МРХ отримано комплекс даних про утри-мування біологічно активних сполук (естери 4-гідроксибензойної кислоти, ароматичні вугле-водні та їх гідрокси-, хлор-, нітропохідні, конденсовані вуглеводні, бенздіазепіни, ?-блокатори та ін.). Виявлено можливості і специфіку побудови кількісних залежностей утримування-властивість за даними МРХ з використанням двох підходів: лінійні залежності енергій сольва-тації (LSER) та залежності структура-утримування (QSRR). Моделі LSER, що базуються на використанні фізико-хімічних дескрипторів, добре описують утримування в МРХ та дозволя-ють виявити специфічні характеристики хроматографічних систем, модифікованих спиртами або кислотами. Поповнено масив даних про фізико-хімічні дескриптори, що специфічні для МРХ і біорозподільної хроматографії і описують взаємодії у мікрогетерогенних рухомих фа-зах. Визначено константи іонізації у міцелярному середовищі і константи зв'язування речовин міцелярними псевдофазами додецилсульфату натрію та Бридж 35 для аліфатичних карбонових кислот, амінокислот, амінодифосфонових кислот, естерів 4-гідроксибензойної кислоти. Для побудови моделей QSRR, що базуються на використанні квантово-механічних де-скрипторів, запропоновано новий хемометричний підхід, що забезпечує ефективне скорочення вихідного масиву дескрипторів і полягає в цілеспрямованому відборі найбільш інформативних дескрипторів за зваженими частотами випадків їх найкращої кореляції з експериментальними даними. Хемометричний спосіб оптимізації умов хроматографічного розділення, запропонований раніше для МРХ, поширено на розповсюджений метод нормально-фазової ТШХ. Кращим гло-бальним критерієм розділення виявився добуток факторів розділення хроматографічних зон. Адекватність оптимізації та прогностичність моделей підтверджено на прикладі розділення 7 харчових барвників. Вперше для моделювання процесів в міцелярній ТШХ застосовано мо-дель Гіддінса. Вплив спиртів-модифікаторов міцелярного елюенту на час хроматографування пояснено зменшенням поверхневого натягу рухомої фази при переході від етанолу до 1-пентанолу. Вперше створено підхід до тестування в умовах МРХ хроматографічних колонок різних торгових марок зі стаціонарними фазами на основі октадецилсилікагелю С18, що дозволяє обирати колонки, однакові за селективністю розділення. Як свідчать результати кластерного аналізу, індивідуальні особливості колонок різних торгових марок суттєво менше проявляють-ся в режимі МРХ, ніж в режимі обернено-фазової ВЕРХ. Режим МРХ визнано більш перспек-тивним та універсальним для досліджень кількісних залежностей структура-утримування та інших фізико-хімічних залежностей, ніж режим обернено-фазової ВЕРХ. З застосуванням міцелярних рухомих фаз створено нові методики: розділення водо- і жи-ророзчинних вітамінів та флавоноїдів в ізократичному режимі; кількісного визначення флаво-ноїдів в лікарській рослинній сировині та препаратах методом МРХ, кількісного визначення домішки 4-амінобутанової кислоти в субстанції алендроната натрію методом міцелярної ТШХ. У порівнянні з нормативними методиками значно скорочено

час аналізу і витрати токсичних органічних розчинників.

Реферат англійською:

The purpose of work is to receive a set of the retention data of biologically active compounds in micellar liquid chromatography (MLC) and to construct the adequate multiparametric models for prediction of the biological activity of new compounds. Create a model for physical-chemical de-scription of interactions in microheterogeneous mobile phases used in modern hybrid methods of analysis. Methods: spectrophotometry, potentiometry, MLC, HPLC, quantum-chemical calculation, cluster analysis, principal component analysis, chemometrics, test analysis. Obtained results and novelty: A set of retention data of biologically active compounds (esters of 4-hydroxybenzoic acid, aromatic hydrocarbons and their hydroxy-, chloro-, nitro-derivatives, con-densed hydrocarbons, benzodiazepines, ?-blockers and others) was received by using MLC tech-nique. The possibilities and specific character of quantitative property-retention relationships model-ing in MLC have been investigated by using two approaches: the linear solvation energies relation-ships (LSER) and the quantitative structure-retention relationships (QSRR). LSER models, based on the use of physicochemical descriptors, are well describe the retention in MLC and permit to reveal the specific characteristics of chromatographic systems modified by alcohols or acids. An array of data on physical-chemical descriptors that are specific for MLC and biopartition chromatography, which describe the interactions in microheterogeneous mobile phases, was obtained. The ionization constants of several groups of substances in the micellar medium and the binding constants of ali-phatic carboxylic acids and esters of 4-hydroxybenzoic acids by micellar pseudophases of sodium dodecyl sulfate and Brij 35 were estimated. A new chemometric approach that ensures the effective reduction of initial descriptors array for construction of QSRR models, based on the use of calculated descriptors was propose. This ap-proach is based on the goal-directed selection of the most informative descriptors by using weighted incidence of their best correlations with experimental data. The chemometric method of optimization of the chromatographic separation, which has been proposed previously for MLC, was extended to widespread method of normal-phase TLC. It was found, that the best global criterion of separation is the product of discrimination factors of chroma-tographic spots. Adequacy of optimization and predictive power of models was confirmed by separa-tion of 7 food dyes. Giddins model was applied to simulate processes in micellar TLC for the first time. The effect of alcohols, modifying of the micellar eluent, on the the chromatographic time was accounted by decrease of surface tension of the mobile phase for the transition from ethanol to 1-pentanol.For the first time an approach for comparison of the chromatographic octadecyl silica columns (C18), produced by different trade mark, under MLC conditions has been developed. It allows to choose the chromatographic columns with similar separation selectivity. As follows from cluster analysis data, the individual properties of different trade mark columns are appeared to less extend in MLC mode than in the reversed-phase HPLC mode. The MLC method found to be more promising and versatile for construction of the quantitative structure-retention relationships and other physical-chemical investigations in comparison with the reversed-phase HPLC. New methods with the use of micellar mobile phases were developed for the separation of wa-ter- and fat-soluble vitamins and flavonoids in isocratic mode; for quantification of flavonoids in me-dicinal plant materials and preparations by using MLC method, for determination of impurity of 4-aminobutanoic acid in sodium alendronate substance by using micellar TLC. The time of analysis and consumption of toxic organic solvents are reduced significantly in comparison with conventional techniques.

Індекс УДК: 547, 615.074+544.344.012-14

Коди тематичних рубрик: 31.21

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Логінова Лідія Павлівна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комплекс даних про утримування біологічно активних сполук в умовах міцелярної рідинної хроматографії (МРХ) і на цій основі побудувати адекватні мультипараметричні моделі для прогнозування біологічної активності нових сполук. Створити моделі для фізико-хімічного опису взаємодій у мікрогетерогенних рухомих фазах, що застосовуються в сучасних гібридних методах аналізу. Методи:

Назва НТП англійською: Create a model for physical-chemical de-scription of interactions in microheterogeneous mobile phases used in modern hybrid methods of analysis. Methods: spectrophotometry, potentiometry, MLC, HPLC, quantum-chemical calculation, cluster analysis, principal component analysis, chemometrics, test analysis.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Отриман комплекс данних про утримання біологічно аетивних сполук в умовах міцелярної родинної хроматографії (МХР) на цій основі побудувати адекватні мультипараметричні моделі для прогнозування біологічної актівності нових сполук. Створена модель для фізико-хімічного опису взаємодій у мікрогетерогенних рухомих фазах, що застосовуються в сучасних гібридних методах аналізу.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2010-2011 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: ВНЗ України

Перспективні ринки: -

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Залюбовський Ілля Іванович

Перелік осіб-виконавців

Єдаменко Д.

Бойченко О.

Власенко Г.

Дробот Д.

Коновалова О.

Левін І.

Логінова Л.

Нікітіна Н.

Фролова А.

Чернишова О.

Шолом В.

Яковлева О.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

