# Облікова картка ДіР

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0221U105842

**Державний реєстраційний номер:** 0120U104785

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 06-09-2021

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 2

**Назва етапу:** Об'єднаний Визначальний і Підхоплюваний

**Початок етапу:** 05.2021

**Закінчення етапу:** 08.2021

**Вид звітного документа:** Проміжний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 23759880

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380573409343, 380573409339

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Національний фонд досліджень України

**Код за ЄДРПОУ:** 42734019

**Місцезнаходження:** вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Кабінет Міністрів України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 380442981622

## 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):** 2201300

| |
|---|
| **Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):** 3303.431 |

## VII. Відомості про ДіР

### Назва роботи українською:

Поліфармакофорні органічні сполуки на основі пептидоміметиків та анельованих бензодіазепинів

### Назва роботи англійською:

Polypharmacophoric organic compounds based on peptidomimetics and annelated benzodiazepines

### Реферат українською:

На другому етапі роботи розроблялись нові та вдосконалювались існуючі методики синтезу проміжних та цільових сполук, вивчались фізико-хімічні властивості синтезованих сполук, проводились спектральні та хроматографічні дослідження. Створено фармакофорні моделі рецептору Abl-протеїнкінази та канабіноїдних рецепторів CB1 і CB2. досліджувалась розчинність синтезованих сполук відповідно до вимог Державної Фармакопеї України і вивчалась мембранотропна дія синтезованих сполук і їх вплив на структуру та мікров'язкість модельних ліпідних мембран.

### Реферат англійською:

At the second stage of the work new and improved methods of synthesis of the intermediates and the target compounds were developed, physicochemical properties of synthesized compounds were studied, spectral and chromatographic researches were carried out. Pharmacophore models of Abl protein kinase receptor and cannabinoid receptors CB1 and CB2 have been developed. The solubility of the synthesized compounds was studied in accordance with the requirements of the State Pharmacopoeia of Ukraine and the membranotropic action of the synthesized compounds and their influence on the structure and microviscosity of model lipid membranes were studied

**Індекс УДК:** 547.7/.8, 547

**Коди тематичних рубрик:** 31.21.27, 31.21

**Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Чебанов Валентин Анатолійович

**Науковий ступінь:** д. х. н.

**Вчене звання:** професор, член-кор.

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Поліфармакофорні органічні сполуки на основі пептидоміметиків та анельованих бензодіазепинів

**Назва НТП англійською:** Polypharmacophoric organic compounds based on peptidomimetics and fused benzodiazepines

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** Хімія, хімічна технологія

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Метою проєкту є розробка нових ефективних синтетичних підходів до фармакоперспективних структурно складних органічних сполук на основі тандемного комбінування багатокомпонентних і клік-реакцій з використанням некласичних методів активації. Основні завдання проекту: на основі стратегії тандемного комбінування багатокомпонентних реакцій і методів клік-хімії розробити синтетичні підходи до 1,4-бензодіазепінів і протяжних пептидоміметиків. In silico дослідити віртуальні бібліотеки сполук на спорідненість до певних мішеней. Методом спінових зондів провести скринінг синтезованих сполук за мембранотропною дією та їх впливом на структуру і мікров'язкість мембран. Методологія дослідження полягає у розробці шляхів одержання гетероциклічних і протяжних пептидоміметиків тандемним комбінуванням двох або трьох багатокомпонентних реакцій. Комбінування реакції Угі з 1,3-диполярним циклоприєднанням. Використання методів Ligand-based Virtual Screening і Structure-based Virtual Screening.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Впровадження не передбачається

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:**

**Закінчення етапу:**

**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 обгрунтування:**

**Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**

**Очікуваний термін окупності (років):**

**Додаткова інформація:**

## IX. Бібліографічний опис

## X. Заключні відомості

**Керівник юридичної особи** Бєліков Костянтин Миколайович
к. х. н.

**Перелік осіб-виконавців**

**Відповідальний за підготовку облікових документів** Машкіна А.Ю.

**Телефон** +38 (057) 341-04-70

**Реєстратор**

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

