

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100294

Державний реєстраційний номер: 0120U100110

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Узагальнення та систематизація новітніх літературних даних щодо спектру властивостей похідних азолу як потенційних біологічно активних сполук відповідно до їх структурних особливостей та типу біологічної дії. Розробка QSAR моделей та прогноз активності досліджених сполук. Експериментальні дослідження.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього 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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445599800, 380445585388

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: 380442350981

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): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1630.01
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження властивостей нових низькомолекулярних сполук як потенційних біорегуляторів широкого спектру дії.

Назва роботи англійською:

Studies of novel low molecular weight compounds as potential broad spectrum bioregulators.

Реферат українською:

Об'єктами дослідження є онієві солі на основі катіонів імідазолію, піридинію, гуанідинію та фосфонію, а також похідні азолу як біорегулятори широкого спектру антимікробної активності. Антимікробний потенціал довголанцюгових онієвих солей забезпечується довжиною алкільного радикалу, функціоналізованого полярними естерними і/або гідроксильними групами. Антимікробні властивості трифенілфосфонієвих солей визначаються природою гетероатома в азольному кільці, замісниками в положенні 2 та 5 гетероциклу та типом аніону. Запропоновано потенційні молекулярні механізми антигрибкової дії довголанцюгових онієвих солей як інгібіторів N- міристоїлтрансферази гриба *Candida albicans* і антибактеріальної дії фосфонієвих солей як інгібіторів глікозилтрансферази *Staphylococcus aureus*. Створена 3D модель фруктозо-1,6-біс-фосфата альдолази *C. albicans*, яка запропонована для пошуку та дизайну нових 4-фосфорильованих похідних 1,3-оксазолу із специфічним молекулярним механізмом дії. Отримані результати роботи свідчать про актуальність та перспективність подальших досліджень нових біорегуляторів на основі похідних азолу як ефективних антимікробних агентів.

Реферат англійською:

The objects of study are imidazolium, pyridinium, guanidinium, phosphonium based onium salts and azole derivatives as bioregulators of a wide range of antimicrobial activity. The subjects of study are antimicrobial activity, QSAR modeling and docking. The purpose of the work is in vitro study a series of onium salts and azole derivatives as new potential antimicrobials using QSAR and molecular docking methods. The antimicrobial potential of long-terminal onium salts is provided by the alkyl radical length functionalized by polar ester and/or hydroxyl groups. The antimicrobial properties of triphenylphosphonium salts are determined by the nature of the heteroatom in the azole ring, substituents at positions 2 and 5 of the heterocycle and the type of anion. *Candida albicans* N-myristoyltransferase and *Staphylococcus aureus* glycosyltransferase are proposed as potential molecular targets action of long-chain and phosphonium onium salts respectively. The created homologous 3D model of fructose-1,6-bis-phosphat aldolase *C. albicans* is proposed as a tool for searching and designing of new 4-phosphorylated 1,3-oxazole derivatives with a specific molecular mechanism of action. Results obtained demonstrate the actuality and the promise of further research into novel azole derivatives-based regulators as effective antimicrobials.

Індекс УДК: 577.17;577.12.05

Коди тематичних рубрик: 31.27.37

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: Потенційні молекулярні механізми активності ряду онієвих солей та похідних азолу як інгібіторів *C. albicans* N-myristoyltransferase and *S. aureus* glycosyltransferase з високою антимікробною потенцією.

Назва НТП англійською: The potential activity molecular mechanisms of series onium salts andazole derivatives as inhibitors of *C. albicans* N-myristoyltransferase and *S. Aureus* glycosyltransferase with high antimicrobial potency are proposed.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Медицина та медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Антимікробний потенціал довголанцюгових онієвих солей забезпечується довжиною алкільного радикалу, функціоналізованого естерними або гідроксильними групами, а трифенілфосфонієвих солей - природою гетероатому в азольному кільці, замісниками в положенні 2 та 5 гетероциклу та типом аніону. Потенційні молекулярні механізми антимікробної дії довго ланцюгових онієвих солей асоційовані з інгібуванням N-міристоїлтрансферази *C. albicans*, а фосфонієвих солей - глікозилтрансферази *S. aureus*. Довголанцюгові онієві солі із алкілоксикарбонілметильними замісниками та ряд солей 1,3-оксазол-4-ілтрифенілфосфонію є перспективними сполуками-кандидатами як дезінфікуючі агенти з широким спектром протимікробної дії. Гомологічна 3D модель фруктозо-1,6-біс-фосфаталядолази *C. albicans*, запропонована для пошуку та дизайну нових 4-фосфорильованих похідних 1,3-оксазолу, ефективних проти резистентних штамів гриба роду *Candida*. Представлено азотовмісні бісфосфонати як новий клас антимікотиків з високою потенцією активності проти резистентних штамів гриба роду *Candida* як інгібіторів фарнезилпірофосфатсинтази.

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:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Вищі навчальні заклади

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:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Kovalishyn V., Hodyna D., Sinenko V. O. [et al.]. Hybrid Design of Isonicotinic Acid Hydrazide Derivatives: Machine Learning Studies, Synthesis and Biological Evaluation of their Antituberculosis Activity. Current Drug Discovery Technologies. 2020. Vol. 17. P. 365-375.
2. Abramenko N., Kustov L., Metelytsia L. [et al.]. A review of recent advances towards the development of QSAR models for toxicity assessment of ionic liquids. Journal of Hazardous Materials. 2020. Vol. 384. P. 121489 (1-14) .
3. Trush M. M., Semenyuta I.V., Hodyna D. [et al.]. Functionalized imidazolium-based ionic liquids: biological activity evaluation, toxicity screening, spectroscopic, and molecular docking studies. Medicinal Chemistry Research. 2020. Vol. 29. P. 2181-2191.
4. Metelytsia L., Trush M., Semenyuta I. [et al.]. Ionic Liquids with Anti-Candida and Anticancer Dual Activity as Potential N-myristoyltransferase Inhibitors. Current Bioactive Compounds. 2020. Vol.16, № 7. P. 1036-1041.
5. Полімерний біоцид для корабельних фарб з антиобростаючими властивостями : пат. 122352 Україна : МПК C08G 73/00, C07C 279/00, A01N 47/40, A01P 1/00. № 122352 ; заявл. 11.06.2018 ; опубл. 16.10.2020, Бюл. № 20.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович

д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Година Діана Миколаївна

(к.б.н., 02.00.10)

Дерев'янка Катерина Юріївна

Калашнікова Лариса Євгенівна

(к.б.н., 02.00.10)

Ковалішин Василь Володимирович

(к.х.н., 02.00.10)

Семенюта Іван Володимирович

(к.б.н., 02.00.10)

Труш Марія Миколаївна

Шут Олександр Олександрович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бондаренко О.М.

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

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

