

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U003691

Державний реєстраційний номер: 0120U000416

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-06-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Фармако-математичний аналіз результатів скринінгу аналгетичної та протизапальної дії похідних моно-, ди- та трициклічних нітрогеновмісних гетероциклів для спрямованого пошуку нових БАР

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державна установа "Інститут фармакології та токсикології" Національної академії медичних наук України

Код за ЄДРПОУ: 02011901

Місцезнаходження: вул. Антона Цедіка, буд. 14, м. Київ, 03057, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444564256, 380444561346

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія медичних наук України

Код за ЄДРПОУ: 00061125

Місцезнаходження: вул. Герцена, буд. 12, м. Київ, 04050, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444893981

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6561040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 7251.700

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фармако-математичний аналіз результатів скринінгу аналгетичної та протизапальної дії похідних моно-, ди- та трициклічних нітрогеновмісних гетероциклів для спрямованого пошуку нових БАР

Назва роботи англійською:

Pharmaco-mathematical analysis of the results of the screening of derivatives of mono-, di-, and tricyclic nitrogen-containing heterocycles with analgetic and anti-inflammatory activity for drug design new bioactive compounds

Реферат українською:

Проведено in silico-аналіз активних сайтів зв'язування арахідонової кислоти, еталонного препарату ndga та нових БАР з біомішенню ЛОГ-5, відомих НПЗП, нових БАР з біомішеннями ЦОГ-1, ЦОГ-2. Синтезовані нові БАР в рядах тетрагідроазепіну, триазоло-азепіну, імідазо-азепіну, імідазо[1,2-а]азепін-3-ону та триазациклопента[cd]-азулену, проведено їх фармакологічного тестування. Вивчені особливості зв'язку "структура - активність" як елементу системи оцінки біологічних ефектів фізіологічно активних речовин у медичних технологіях спрямованого пошуку нових БАР. За результатами фармакологічного тестування значну аналгетичну та протизапальну активність проявили: тетрагідроазепін 2518 (-80,04 та -43,54) %, імідазо-азепіни 2614, 2615 ((-39,04; -36,04 та -84,68; -68,79) %, триазоло-триазин 4774 (-60,81 та -31,20) % у порівнянні з кеторолаком да диклофенаком (-85,89 та -44,37) %, відповідно.

Реферат англійською:

An in silico analysis of the active binding sites of arachidonic acid, the reference drug ndga, and new BARs with the biotarget of LOG-5, known NSAIDs, and new BARs with the biotargets of COX-1, COX-2 was performed. New BARs in the series of tetrahydroazepine, triazolo-azepine, imidazo-azepine, imidazo[1,2-a]azepin-3-one and triazacyclopenta[cd]-azulene were synthesized, and their pharmacological testing was carried out. Peculiarities of the relationship "structure - activity" as an element of the system for evaluating the biological effects of physiologically active substances in medical technologies aimed at the search for new BARs were studied. According to the results of pharmacological testing, the following showed significant analgesic and anti-inflammatory activity: tetrahydroazepine 2518 (-80.04 and -43.54) %, imidazo-azepines 2614, 2615 ((-39.04; -36.04 and -84.68; - 68.79) %, triazolo-triazine 4774 (-60.81 and -31.20) % in comparison with ketorolac and diclofenac (-85.89 and -44.37) %, respectively.

Індекс УДК: 615.03; 615.1/.3, 615.015.11

Коди тематичних рубрик: 76.31

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Демченко Анатолій Михайлович

Науковий ступінь: д. фармацев. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Серединська Наталія Миколаївна

Науковий ступінь: д. мед. н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Бухтіарова Тетяна Анатоліївна

Перелік осіб-виконавців

Бобкова Людмила Станіславівна

Лук'янчук Віктор Дмитрович

(д.мед.н., професор, 14.03.05, 14.03.06)

Ядловський Олег Євгенійович

(д. б. н., 14.03.05)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Хавич Ольга Олександрівна

Телефон

+38 (044) 456-30-11

Реєстратор

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна