

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U101088

Державний реєстраційний номер: 0116U008925

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Синтез, встановлення будови та вивчення фізико-хімічних властивостей гексафторосилікатів з "онієвими" катіонами піридиноцтової кислоти. Дослідження карієспрофілактичної ефективності отриманих гексафторосилікатів

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487233324, 380487233567, 380487178905

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Одеський національний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010801

Місцезнаходження: Валіховський провулок, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487233324

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7704 - власні кошти, кошти підприємств, установ, організацій, фізичної особи на виконання ініціативних робіт

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 30

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пошук нових карієспротекторних агентів у ряді гексафторосилікатів із біологічно-активними "онієвими" катіонами

Назва роботи англійською:

The search for new caries preventive agents in a number of hexafluorosilicate with biologically active "onium" cations

Реферат українською:

Здійснено синтез нової сполуки – 3-гідроксиметилпіридинію гексафторосилікату моногідрату (I). За даними РСА, іонна структура I стабілізована Н-зв'язками $\text{OH}\cdots\text{O}$, $\text{NH}\cdots\text{F}$, $\text{OH}\cdots\text{F}$ та контактами $\text{CH}\cdots\text{F}$. Визначені значення розчинності солі I в воді, метанолі, етанолі (96 %) та диметилсульфоксиді. Розроблені адекватні 2D моделі QSPR для аналізу розчинності у воді амонієвих гексафторосилікатів. Модель M1 дозволяла досліджувати вплив різних фізико-хімічних та структурних факторів на розчинність у воді амонієвих гексафторосилікатів. Модель QSPR M2 могла з достатньою точністю передбачити розчинність нових сполук досліджуваного типу. Проведено віртуальний аналіз біологічної активності і ліпофільності комерційно доступних похідних піридину, що містять протизапальні фармакофори, як можливих кандидатів для синтезу антикарієсних агентів. За даними розрахунків, вивчені похідні піридину належать до малотоксичних "drug-like" сполук.

Реферат англійською:

A synthesis of new compound – 3-hydroxymethylpyridinium hexafluorosilicate monohydrate was carried out. According to the X-ray diffraction analysis, the ionic structure I is stabilized by H-bonds $\text{OH}\cdots\text{O}$, $\text{NH}\cdots\text{F}$, $\text{OH}\cdots\text{F}$ and contacts $\text{CH}\cdots\text{F}$. The values of solubility I in water, methanol, ethanol (96 %) and dimethylsulfoxide were determined. Adequate 2D QSPR models were developed to analyzed the water solubility of ammonium hexafluorosilicates. Model M1 examined the influence of various physicochemical and structural factors on the water solubility of the ammonium hexafluorosilicates. QSPR model M2 could predict the solubility of new compounds of the studied type with satisfactory accuracy. A virtual analysis of the biological activity and lipophylicity of commercially available pyridine derivatives containing anti-inflammatory activity pharmacophores as possible candidate for synthesis of anticaries agents was carried out. According to the calculations, all the studied pyridine derivatives can be classified as low toxic «drug-like» compounds.

Індекс УДК: 615.31, 615.1:546.286: 616.314-002.4

Коди тематичних рубрик: 76.31.35

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Гельмбольдт Володимир Олегович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові карієспротекторні агенти у ряді гексафторосилікатів із біологічно-активними "онієвими" катіонами

Назва НТП англійською: New caries preventive agents in a number of hexafluorosilicate with biologically active "onium" cations

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології

Галузь застосування: медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Здійснено синтез нової сполуки – 3-гідроксиметилпіридинію гексафторосилікату моногідрату (I). За даними PCA, іонна структура I стабілізована Н-зв'язками $\text{OH}\cdots\text{O}$, $\text{NH}\cdots\text{F}$, $\text{OH}\cdots\text{F}$ та контактами $\text{CH}\cdots\text{F}$. Визначені значення розчинності солі I в воді, метанолі, етанолі (96 %) та диметилсульфоксиді. Розроблені адекватні 2D моделі QSPR для аналізу розчинності у воді амонієвих гексафторосилікатів. Модель M1 дозволяла досліджувати вплив різних фізико-хімічних та структурних факторів на розчинність у воді амонієвих гексафторосилікатів. Модель QSPR M2 могла з достатньою точністю передбачити розчинність нових сполук досліджуваного типу. Проведено віртуальний аналіз біологічної активності і ліпофільності комерційно доступних похідних піридину, що містять протизапальні фармакофори, як можливих кандидатів для синтезу антикарієсних агентів. За даними розрахунків, вивчені похідні піридину належать до малотоксичних "drug-like" сполук.

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: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2021

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Гельмбольдт В.О., Литвинчук І.В., Шишкін І.О., Огніченко Л.М., Кузьмін В.Є. Прогноз біологічної активності і ліпофільності деяких похідних піридину як компонентів антикарієсних агентів // Фарм. журнал. – 2020. – Т. 75, № 2. – С. 79-85.
2. Gelmboldt V.O., Shyshkin I.O., Anisimov V.Yu., Fonari M.S., Kravtsov V.Ch. Bis(3-hydroxymethylpyridinium) hexafluorosilicate monohydrate as a new potential anticaries agent: Synthesis, crystal structure and pharmacological properties // J. Fluorine Chem. – 2020. – V. 235. – 109547.
3. Gelmboldt V., Ognichenko L., Shyshkin I., Kuz'min V. QSPR models for water solubility of ammonium hexafluorosilicates: analysis of the effects of hydrogen bonds // Structural Chemistry. – 2020.
<https://doi.org/10.1007/s11224-020-01652-3>

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вастьянов Руслан Сергійович
д. мед. н.

Перелік осіб-виконавців

Анісімов Володимир Юрійович
(к.б.н.)

Гельмбольдт Володимир Олегович
(д.х.н.)

Литвинчук Ірина Вікторівна

Пристапа Богдан Володимирович
(к.б.н.)

Рожковський Ярослав Володимирович
(д.мед.н.)

Шишкін Іван Олегович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Криштальова Надія Миколаївна

Телефон

+38 (097) 587-58-71

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності

