

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U001247

Державний реєстраційний номер: 0115U000483

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-02-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Мікроскопічна структура та динаміка неупорядкованих конденсованих систем.

Початок етапу: 01.2015

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітнього документа: Проміжний 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: (057)705 12 47, 705 12 48

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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): 2201020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 316
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Концептуальні засади прогнозування функціональних властивостей іон-молекулярних систем та молекулярних комплексів

Назва роботи англійською:

Conceptual Foundations prediction of functional properties of ion-molecular systems and molecular complexes

Реферат українською:

Об'єкти дослідження: іонні рідини на основі солей імідазолію, таіонна асоціація у неводних розчинах літієвих солей, фальципаїн-2, 11-?-гідроксистероїддегідрогеназа 1-го типу, заміщені 1,2,4-оксодіазоли. Мета роботи: Одержання надійної та детальної інформації з мікроскопічної структури, іонної та міжчастинкових взаємодіях у рідких неводних іон-молекулярних системах та іонних рідинах; пошук моделей для ефективної класифікації потенційних інгібіторів фальципаїну-2; пошук ефективних інгібіторів 11-?-гідроксистероїддегідрогенази 1-го типу. Метод дослідження: молекулярно-динамічне (МД) моделювання, ab initio квантово-хімічні розрахунки, нейронні мережі Кохонена, віртуальний скринінг, молекулярний докінг. Проведено МД моделювання з метою дослідити деталі відносного розподілу іонів в низці імідазолієвих іонних рідинах з катіоном 1-бутил-3-метилімідазолій ($C4mim^+$) та аніонами OAc^- , Cl^- , BF_4^- , PF_6^- , TfO^- і $TFSA^-$. Було встановлено, що сильно основні аніони OAc^- і Cl^- переважно розташовуються у площині імідазолієвого кільця біля груп C-H. Великі та слабо координовані аніони переважно займають положення над/під кільцем. Зв'язування аніонів з алкільними гідрогенами катіона а також агрегація катіонів через вуглеводневі хвости нечутливі до природи аніона. На прикладі літій бісоксалатобората у бінарному розчиннику етиленкарбонат - диметилкарбонат було показано що для кількісного опису електролітних систем необхідний комбінований дискретно-континуальний підхід. Обчислені величини зміни енергії Гіббса завищені по порядку величини як континуальною, так і дискретною моделями сольватації але мають протилежні знаки. При цьому фізично обґрунтований дискретно-континуальний підхід передбачає слабку іонну асоціацію. В ході досліджень було перевірено продуктивність нейронних мереж Кохонена для класифікації різних класів сполук у відповідності до їх активності проти фальципаїну-2. Навчена мережа дозволяє легко спрогнозувати, чи проявлятиме конкретна сполука активність проти фальципаїну-2, з рівнем похибок та продуктивності, прийнятними для початкових етапів скринінгу бібліотек хімічних сполук.

Реферат англійською:

Objects of investigation: imidazolium ionic liquids, ion association in non-aqueous solutions of Li-based electrolytes, falcipain-2, 11?-Hydroxysteroid dehydrogenase 1, substituted 1,2,4-oxadiazoles. The aim of this work is to obtain detailed and reliable information on the microscopic structure and interparticle interactions in nonaqueous ion-molecular systems and ionic liquids. Searching for the models for effective classification of potential falcipain-2 inhibitors; searching for the effective inhibitors of 11?-Hydroxysteroid dehydrogenase 1. Methods of investigation: molecular dynamics simulation, ab initio quantum chemical calculations, Kohonen neural network, virtual screening, molecular docking. We employed classical molecular dynamics (MD) simulations to study in detail the spatial, radial, and orientational relative distribution of ions in a set of imidazolium-based ILs, in which the 1-butyl-3-methylimidazolium ($C4mim^+$) cation is coupled with the OAc^- , Cl^- , BF_4^- , PF_6^- , TfO^- and $TFSA^-$ anion. It was established that strongly basic anions, such as OAc^- and Cl^- prefer to be located in the imidazolium ring plane next to the C-H2/4-5 sites. By contrast, the other four bulky and weakly coordinating anions tend to occupy positions above/below the plane. Other IL-specific details related to the multiple H-bonding and cation stacking issues are also discussed in the paper. The secondary H-bonding of anions with the alkyl hydrogen atoms of cations as well as the cation-cation alkyl chain aggregation turned out to be poorly sensitive to the nature of the anion. Focusing on lithium bis(oxalato)borate, LiBOB, we show that so-called

discrete-continuum solvation approach is required in order to characterize the ion association at the quantitative level. The calculated changes of the Gibbs free energy are overestimated by nearly an order of magnitude by the purely continuum and purely discrete approaches, with the values having the opposite signs. The physically balanced discrete-continuum description predicts weak ion association. In the course of research Kohonen neural network performance has been verified for the classification of different classes of compounds according to their activity against falcipain-2. Learning network makes it easy to predict whether a particular compound exhibits activity against falcipain-2, with the level of errors and performance that is suitable for the initial stages of chemical compounds libraries screening.

Індекс УДК: 541.1:001.18, 541.8

Коди тематичних рубрик: 31.15.01.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Вьюник Іван Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методика класифікації різних класів сполук у відповідності до їх активності проти фальципаїну-2.

Назва НТП англійською: Method for the classification of different classes of compounds according to their activity against falcipain-2.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: 72.19 Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Перевірено продуктивність нейронних мереж Кохонена для класифікації класів сполук по їх активності проти фальципаїну-2. Мережа дозволяє спрогнозувати, чи проявлятиме сполука активність проти фальципаїну-2, з рівнем похибок прийнятним для початкових етапів скринінгу бібліотек хімічних сполук.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2016-2019 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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Ion Association in Aprotic Solvents for Lithium Ion Batteries Requires Discrete?Continuum Approach: Lithium Bis(oxalato)borate in Ethylene Carbonate Based Mixtures / O. M. Korsun, O. N. Kalugin, I. O. Fritsky, O. V. Prezhdo // J. Phys. Chem C. - 2016. - V. 120, N. 30. - P. 16545-16552. DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b05963. Molecular Modelling on Solutions of 1-1'-Spirobipirrolidinium Tetrafluoroborate in Acetonitrile / I. S. Vovchynskyi, Y. V. Kolesnik, Y. I.

Filatov, O. N. Kalugin // J. Mol. Liq. - 2016. DOI: 10.1016/j.molliq.2016.12.029. 2. Константы ассоциации в растворах литиевых солей в бутиролактоне и смеси пропиленкарбоната с 1,2-диметоксиэтаном (1 : 1) по данным кондуктометрии / Т. В. Черножук, Ю. С. Шерстюк, Д. О. Новиков, О. Н. Калугин // Ж. физ. химии. - 2016. - Т. 90, № 2. - С. 210-205.

Х. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Катрич Віктор Олександрович

Перелік осіб-виконавців

Батрак А.

Вовчинський І.

Вьюник І

Головізнiна К.

Калугін О.

Коверга В.

Колесник Я.

Корсун О.

Кравченко А.

Мереха Б.

Новіков Д.

Нікітіна А.

Рябчунова А.

Ткаченко В.

Філатов Я.

Черножук Т.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

