

Реєстраційна картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0118U100533

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-12-2018



II. Підстава для проведення робіт

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): 2201040

У тому числі по роках:	
2018	60.000 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 60.000 тис. грн.	

III. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

IV. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код за ЄДРПОУ: 02010793

Місцезнаходження: вул. Пекарська, буд. 69, м. Львів, Львівська обл., 79010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322603066, 380322757632

V. Відомості про співвиконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код за ЄДРПОУ: 02010793

Місцезнаходження: вул. Пекарська, буд. 69, м. Львів, Львівська обл., 79010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322603066, 380322757632

VI. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Рациональний дизайн біологічно активних речовин серед конденсованих похідних на основі 4-тіоксотіазолідин-2-ону із використанням методів хемоінформатики та комп'ютерної хімії

Назва роботи англійською:

Rational design of biologically active substances among condensed 4-thioxythiazolidine-2-one based derivatives with chemoinformatics tools and computational chemistry techniques implementation

Мета роботи українською:

Розробка препаративно зручних методик синтезу нових конденсованих похідних на основі 4-тіокситіазолідин-2-ону, зокрема, тіазоло[4,5-*b*]піридинів та тіазоло[4,3-*b*]хіназолінів. Буде проведено структурну функціоналізацію базових структур за різними положеннями. Подальше виконання проекту полягатиме у дослідженні синтезованих речовин на прояв протизапальної та антиоксидантної активностей з метою ідентифікації потенційних сполук-«лідерів». Для синтезованих сполук буде проведено ліганд-орієнтований та рецептор-орієнтований віртуальний скринінг. Результати *in silico* досліджень будуть покладені в основу створення комбінаторної бібліотеки конденсованих похідних на основі 4-тіоксотіазолідин-2-ону.

Мета роботи англійською:

The development of preparatory convenient synthetic protocols for novel condensed 4-thioxothiazolidine-2-one based derivatives generation namely thiazolo[4,5-b]pyridines and thiazolo[4,3-b]quinoxolines. Further structural functionalization of the core scaffolds would be realized in their various positions. The next stage of the project would include the pharmacological screening of the synthesized compounds as their anti-inflammatory and antioxidant activities evaluation aimed at lead compounds identification. Ligand-based and receptor-based techniques would be implemented into the process of synthesized compounds virtual screening. As a result of in silico design strategy application the virtual combinatorial library of condensed 4-thioxothiazolidine-2-one based derivatives would be generated.

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Технології

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих наук, медицина, фармація

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Чабан Тарас Ігорович

Науковий ступінь: к. фармац. н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Впровадження підходів раціонального дизайну у процес створення біологічно активних речовин на основі 4-тіоксотіазолідин-2-ону. Розробка препаративно зручних методик та синтез таких похідних за скафолд-орієнтованим принципом, пошук серед них нових «сполук-лідерів» з вираженими протизапальними та антиоксидантними властивостями. Оптимізація структур сполук-«лідерів» із використанням методів хемоінформатики та комп'ютерної хімії з метою отримання високоселективних та низькотоксичних кандидатів в лікарські засоби.

Початок етапу: 11.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 547, 615.1, 547.9; 577.1, 615.012:547.789:547.642

Коди тематичних рубрик: 31.21, 76.31.29.15, 31.23

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Чемерис Орест Мирославович

д. мед. н., 14.01.03

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Кленіна Олена Валеріївна, кандидат фармацевтичних наук, доцент

Телефон

+38 (098) 942-79-56

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.