

Реєстраційна картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0121U111872

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-06-2021

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): 6541030

У тому числі по роках:	
2021	65.000 тис. грн.
2022	130.000 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 195.000 тис. грн.	

III. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи: Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

IV. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417325

Місцезнаходження: вул. Мурманська, буд. 5, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445527150, 380445510613, 380445732643

V. Відомості про співвиконавця ДіР

VI. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження ліпофільності фторовмісних циклоалкіламідів та їх конформаційної рівноваги квантово-хімічними методами

Назва роботи англійською:

Investigations of the lipophilicity of fluorine-containing cycloalkylamides and their conformational equilibrium by the methods of quantum chemistry

Мета роботи українською:

Фторовмісні сполуки є важливими об'єктами медичної хімії, що наразі активно досліджуються. Зокрема, в останні роки у фокус уваги розробників лікарських препаратів потрапили фторовані циклоалкани як "білдінг-блоки" біологічно активних молекул. Це пояснюється недостатньою представленістю серед досліджуваних раніше сполук непласких, "тривимірних" молекул у порівнянні з ароматичними сполуками, що характеризуються домінуванням планарних циклів. Нещодавно були знайдені незвичайні закономірності зміни ліпофільності амідів, утворених з циклоалкіламінів, заміщених фторовмісними групами, в залежності від кількості атомів фтору, що введені у молекулу. Так, ліпофільність амідів, заміщених метильною групою, в залежності від кількості атомів водню у ній, заміщених на фтор, не змінюється лінійно, а характеризується мінімумом для монофторозаміщених сполук. Схожу закономірність також виявили й для констант кислотності таких амінів. Такий складний характер залежності вказує на те, що адитивний метод розрахунку фізико-хімічних параметрів, при якому кожна функціональна група характеризується інкрементом, що сумуються для конкретної молекули, є недостатнім для прогнозування таких параметрів навіть для відносно невеликих молекул. Ми вважаємо, що більш надійне передбачення можна зробити (а) враховуючи конформацію молекули замість лише її структури, та (б) включаючи до розрахунку конформаційний ансамбль, наявний у розчині, замість вибору лише найстабільнішої конформації. За допомогою методів хемоінформатики та квантової хімії ми плануємо розробити процедуру швидкої генерації, кластеризації та відфільтрування можливих конформерів та точного розрахунку їх фізико-хімічних параметрів. Метою даної роботи є дослідження взаємозв'язку структури фторовмісних циклоалкіламідів та їх фізико-хімічних властивостей, зокрема ліпофільності. Запропоноване теоретичне дослідження дозволить прогнозувати ці величини для невідомих раніше сполук з великою точністю.

Мета роботи англійською:

Fluorine-containing compounds are the important objects of medicinal chemistry which are currently under active study. In particular, in the recent years the focus of drug developers have been shifted to fluorinated cycloalkanes as the "building blocks" for biologically active molecules. This is due to the lack of representation of non-flat, "three-dimensional" molecules among the previously studied compounds in comparison to aromatic compounds, which are characterized by the dominance of planar cycles. Recently, some unusual correlations have been found between the lipophilicity of fluorinated cycloalkylamides and the number of fluorine atoms introduced into a molecule. For instance, the lipophilicity of methylamides does not change linearly depending on the number of hydrogen atoms in it, substituted by fluorine, but is characterized by a minimum for monofluoro-substituted compounds. A similar pattern was also found for the acidity constants of such amines. This complex nature of the dependence indicates that the additive method of calculating physicochemical parameters is insufficient to predict such parameters even for relatively small molecules. We believe that a more reliable prediction can be made (a) by considering conformations of the molecule instead of its structure only, and (b) including in the calculation the conformational ensemble present in the solution, instead of choosing only the most stable conformation. Using the methods of chemoinformatics and quantum chemistry, we plan to develop a procedure for rapid generation, clustering and filtering of possible conformers and accurate calculation of their physicochemical parameters. The aim of this work is to study the relationship between the structure of fluorine-containing cycloalkylamides and their physicochemical properties, in particular lipophilicity. The proposed theoretical study will allow prediction of these values for previously unknown compounds with high accuracy.

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найважливіших проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кирильчук Андрій Анатолійович

Науковий ступінь: к. х. н.

Наукове звання: н.с

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Літературний пошук. Розробка методики попередньої генерації та фільтрації наборів конформацій

Початок етапу: 07.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 2

Назва етапу: Квантово-хімічні розрахунки на базі отриманих наборів конформерів. Опрацювання отриманих даних, підготовка публікацій

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 547.595, 544 , 539.19; 544.14 , 547 , 547:544.18; 547:544.16; 547:544.12 , 547.51

Коди тематичних рубрик: 31.21.21.15, 31.15, 31.15.03, 31.21, 31.21.15, 31.21.23

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Кальченко Віталій Іванович

д.х.н., 02.00.03, 02.00.08

Відповідальний за підготовку

Кирильчук Андрій Анатолійович

облікових документів

Телефон

+38 (098) 059-11-69

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.