Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0118U100533

Відкрита

Дата реєстрації: 17-12-2018

Статус виконавця: 17 - головний виконавець

1. Загальні відомості

Підстава для проведення робіт: 34 - договір з МОН, іншими центральними органами виконавчої влади

КПКВК: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 60

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2018	60

2. Замовник

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів

Телефон: 0444813275

Телефон: 4814763

E-mail: mon@mon.gov.ua

3. Виконавець

Назва організації: Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02010793

Підпорядкованість: Міністерство охорони здоров`я України

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

Телефон: 0322757632

4. Співвиконавець

Назва організації: Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02010793

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

Підпорядкованість: Міністерство охорони здоров`я України

Телефон: 0322757632

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

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

Назва роботи (англ)

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

Мета роботи (укр)

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 (англ)

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]quinozolines. 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 науково-технічної діяльності: 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

Експерти

Стріха Максим Віталійович (д. ф.-м. н., професор)

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	11.2018	12.2018	Остаточний звіт	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.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21, 76.31.29.15, 31.23

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

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Зіменковський Борис Семенович (д. фармац. н., професор)

Керівники роботи:

Чабан Тарас Ігорович (к. фармац. н.)

Відповідальний за подання документів: Кленіна Олена Валеріївна, кандидат фармацевтичних наук, доцент (Тел.: +38 (098) 942-79-56)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.