# Облікова картка НДДКР

**Державний обліковий номер:** 0221U105842

**Державний реєстраційний номер:** 0120U104785

**Відкрита**

**Дата реєстрації:** 06-09-2021

## 1. Етапи виконання

**Номер етапу:** 2

**Назва етапу:** Об'єднаний Визначальний і Підхоплюваний

**Початок етапу:** 05-2021

**Закінчення етапу:** 08-2021

**Вид звітного документа:** Проміжний звіт

## 2. Виконавець

**Назва організації:** Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 23759880

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Адреса:** проспект Науки, буд. 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

**Телефон:** 380573409343

**Телефон:** 380573409339

**E-mail:** info@isc.kharkov.com

**WWW:** http://www.isc.kharkov.com/

## 3. Власник результатів НДДКР (продукції)

**Назва організації:** Державна наукова установа Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 23759880

**Адреса:** проспект Науки, буд. 60, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61072, Україна

**Підпорядкованість:** Національна академія наук України

**Телефон:** 380573409343

**Телефон:** 380573409339

**E-mail:** info@isc.kharkov.com

**WWW:** http://www.isc.kharkov.com/

## 4. Джерела та напрями фінансування

**Підстава для проведення робіт:** 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

**КПКВК:** 2201300

**Напрям фінансування:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

**Джерело фінансування:** 7713 - кошти держбюджету

**Фактичний обсяг фінансування за звітний етап:** 3303.431 тис. грн.

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Поліфармакофорні органічні сполуки на основі пептидоміметиків та анельованих бензодіазепинів

### Назва роботи (англ)

Polypharmacophoric organic compounds based on peptidomimetics and annelated benzodiazepines

### Реферат (укр)

На другому етапі роботи розроблялись нові та вдосконалювались існуючі методики синтезу проміжних та цільових сполук, вивчались фізико-хімічні властивості синтезованих сполук, проводились спектральні та хроматографічні дослідження. Створено фармакофорні моделі рецептору Abl-протеїнкінази та канабіноїдних рецепторів CB1 і CB2. досліджувалась розчинність синтезованих сполук відповідно до вимог Державної Фармакопеї України і вивчалась мембранотропна дія синтезованих сполук і їх вплив на структуру та мікров'язкість модельних ліпідних мембран.

### Реферат (англ)

At the second stage of the work new and improved methods of synthesis of the intermediates and the target compounds were developed, physicochemical properties of synthesized compounds were studied, spectral and chromatographic researches were carried out. Pharmacophore models of Abl protein kinase receptor and cannabinoid receptors CB1 and CB2 have been developed. The solubility of the synthesized compounds was studied in accordance with the requirements of the State Pharmacopoeia of Ukraine and the membranotropic action of the synthesized compounds and their influence on the structure and microviscosity of model lipid membranes were studied

**Індекс УДК:** 547.7/.8, 547

**Коди тематичних рубрик НТІ:** 31.21.27, 31.21

## 6. Науково-технічна продукція (НТП)

### НТП 1

**Назва продукції (укр):** Поліфармакофорні органічні сполуки на основі пептидоміметиків та анельованих бензодіазепинів

**Назва продукції (англ):** Polypharmacophoric organic compounds based on peptidomimetics and fused benzodiazepines

**Очікувані результати:** Методи, теорії

**Галузь застосування:** Хімія, хімічна технологія

**Опис продукції (укр):** Метою проєкту є розробка нових ефективних синтетичних підходів до фармакоперспективних структурно складних органічних сполук на основі тандемного комбінування багатокомпонентних і клік-реакцій з використанням некласичних методів активації. Основні завдання проекту: на основі стратегії тандемного комбінування багатокомпонентних реакцій і методів клік-хімії розробити синтетичні підходи до 1,4-бензодіазепінів і протяжних пептидоміметиків. In silico дослідити віртуальні бібліотеки сполук на спорідненість до певних мішеней. Методом спінових зондів провести скринінг синтезованих сполук за мембранотропною дією та їх впливом на структуру і мікров’язкість мембран. Методологія дослідження полягає у розробці шляхів одержання гетероциклічних і протяжних пептидоміметиків тандемним комбінуванням двох або трьох багатокомпонентних реакцій. Комбінування реакції Угі з 1,3-

диполярним циклоприєднанням. Використання методів Ligand-based Virtual Screening і Structure-based Virtual Screening.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:** Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

**Стадія завершеності НТП:** Звіт по НДДКР

**Впровадження НТП:** Впровадження не передбачається

**Строки впровадження:**

**Виробник продукції:** ДНУ "НТК "ІМК" НАНУ"

**Споживачі продукції:**

**Перспективні ринки:**

**Права інтелектуальної власності:** Не передбачається

**Форми та умови передачі продукції:** Не передбачається

## 7. Бібліографічний опис

## 8. Звітна документація

**Кількість сторінок в звіті:** 110

**Мова звіту:** Українська

**Кількість файлів у звіті:** 1

## 9. Заключні відомості

**Керівник організації:**

Бєліков Костянтин Миколайович (к. х. н.)

**Керівники роботи:**

Чебанов Валентин Анатолійович (д. х. н., професор, член-кор.)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ**

Юрченко Т.А.