

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000910

Державний реєстраційний номер: 0120U101649

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 21-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез, перетворення та дослідження фізико-хімічних властивостей похідних 1,2,4-тріазолу

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Запорізький державний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010741

Місцезнаходження: проспект Маяковського, буд. 26, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69035, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380612246469

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство охорони здоров'я України

Код за ЄДРПОУ: 00012925

Місцезнаходження: вул. Грушевського 7, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442536194

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2301020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 619.850
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез, модифікація та дослідження властивостей похідних 1,2,4-тріазолу з метою створення антимікробного лікарського засобу

Назва роботи англійською:

Synthesis, modification and study of the properties of 1,2,4-triazole derivatives for the purpose of antimicrobial drug production

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: розробка методів синтезу, дослідження реакційної здатності, хімічних, фізико-хімічних та біологічних властивостей нових похідних 4-R-5-R1-1,2,4-тріазол-3-тіонів та продуктів їх хімічних перетворень. Мета роботи: синтез нових біологічно активних сполук в ряду 1,2,4-тріазолу, дослідження їх фізико-хімічних та біологічних властивостей, встановлення закономірностей зв'язку між хімічною будовою і біологічною дією та впровадження в лікувальну практику нових ефективних засобів на основі похідних 1,2,4-тріазолу з протитуберкульозною активністю. Методи дослідження: при виконанні науково-дослідної роботи використані хімічні методи (реакції алкілювання, відновлення, етерифікації, нейтралізації, гідразінолізу, каталітичної конденсації, циклізації), фізико-хімічні методи (елементний аналіз, ІЧ-, ЯМР- спектроскопія, мас-спектрометрія, рентгеноструктурні дослідження, хроматографічні методи), хеометрічні (квантово-хімічні розрахунки, молекулярний докінг, QSAR-аналіз, віртуальний скринінг, біодоступність), методи математичної статистики. Вперше проведено молекулярний докінг до ферменту «ЕС 2.7.13.3 Histidine kinase» та «ЕС 3.1.3.1 Alkaline phosphatase», як потенційних мішеней для антибактеріальної активності. Розроблено методи синтезу похідних 4-R-5-R1-1,2,4-тріазол-3-тіонів, які можуть мати потенційно низьку токсичність та проявляють протимікробну, фунгіцидну та протитуберкульозну активності. Вдосконалено методики одержання 4-R-5-R1-1,2,4-тріазол-3-тіонів із галогенпохідними сполуками, а також вивчено реакції подальших перетворень заміщених 1,2,4-тріазол-3-тіону із п-галогенкетонами. Оптимізовано методи синтезу відповідних тіонів, а також вперше синтезовано ряд S-алкілпохідних. Будова та індивідуальність отриманих сполук у всіх випадках підтверджена сучасними фізико-хімічними методами аналізу.

Реферат англійською:

Object of research: development of synthesis methods, study of reactivity, chemical, physicochemical and biological properties of new derivatives of 4-R-5-R1-1,2,4-triazole-3-thiones and products of their chemical transformations. Purpose: synthesis of new biologically active compounds in the range of 1,2,4-triazole, study of their physicochemical and biological properties, establishing patterns of connection between chemical structure and biological action and introduction into medical practice of new effective drugs based on derivatives 1,2,4-triazole with antitubercular activity. Research methods: chemical methods (alkylation reactions, reduction, esterification, neutralization, hydrazinolysis, catalytic condensation, cyclization), physicochemical methods (elemental analysis, IR, NMR spectroscopy, mass spectrometry, X-ray diffraction) were used in the research work. research, chromatographic methods), chemometric (quantum chemical calculations, molecular docking, QSAR-analysis, virtual screening, bioavailability), methods of mathematical statistics. For the first time, molecular docking was performed on the enzyme EC 2.7.13.3 Histidine kinase and EC 3.1.3.1 Alkaline phosphatase as potential targets for antibacterial activity. Methods for the synthesis of 4-R-5-R1-1,2,4-triazole-3-thione derivatives have been developed, which may have potentially low toxicity and exhibit antimicrobial, fungicidal and antitubercular activity. Methods for obtaining 4-R-5-R1-1,2,4-triazole-3-thiones with halogen-derived compounds have been improved, and the reactions of subsequent transformations of substituted 1,2,4-triazole-3-thiones with p-haloketones have been studied. Methods for the synthesis of the corresponding thions have been optimized, and a number of S-alkyl derivatives have been synthesized for the first time. The structure and individuality of the obtained compounds in

all cases is confirmed by modern physicochemical methods of analysis.

Індекс УДК: 615.1, 547.792.024.022.057:615.33

Коди тематичних рубрик: 76.31.29.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Панасенко Олександр Іванович

Науковий ступінь: д. фармац. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи синтезу, модифікації та дослідження властивостей похідних 1,2,4-триазолу

Назва НТП англійською: Methods of synthesis, modification and study of properties of 1,2,4-triazole derivatives

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Фармація

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Синтез нових біологічно активних сполук в ряду 1,2,4 триазолу, дослідження їх фізико-хімічних та біологічних властивостей, встановлення закономірностей зв'язку між хімічною будовою і біологічною дією та впровадження в лікувальну практику нових ефективних засобів на основі похідних 1,2,4-триазолу з протитуберкульозною активністю.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції:

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Колесник Юрій Михайлович

д. мед. н., 14.01.02

Перелік осіб-виконавців

Бігдан Олексій Антонович

(к.фарм.н., 15.00.02)

Гоцуля Андрій Сергійович

(д.фарм.н.)

Давиденко Павло Олександрович

(к.вет.н.)

Донченко Анастасія Олександрівна

(к.фарм.н.)

Зажарський Володимир Володимирович

(к.вет.н., 16.00.07)

Карпенко Юрій Вікторович

(к.х.н.)

Карпун Євген Олександрович

Книш Євген Григорович

(д.фарм.н.)

Лисянська Ганна Петрівна

(к.фарм.н.)

Поліщук Наталія Миколаївна

(к.мед.н.)

Сафонов Андрій Андрійович

(к.фарм.н.)

Щербина Роман Олександрович

(к.фарм.н.)

Відповідальний за підготовку

Карпенко Ю.В.

облікових документів

Телефон

+38 (061) 224-60-86

Реєстратор

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

