Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U001883

Державний реєстраційний номер: 0122U001220

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-02-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Синтез найбільш активних лігандів на основі включення диренієвого фрагменту та дослідження реакцій отриманих сполук з різними фрагментами ДНК

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 72, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380563749800, 380563749850

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 38621185

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

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 828.266

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез N,O,S-вмісних гетероциклів та дослідження їх взаємодії з нуклеїновими кислотами

Назва роботи англійською:

Synthesis of N,O,S-containing heterocycles and study of their interaction with nucleic acids

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – in silico та in vitro дослідження, модифікація і синтез N,O,S-гетероциклів, ліганди, комплекси диренію, взаємодія з ДНК та макрофаги. Мета роботи – цілеспрямоване створення нових нуклеотид-зв'язуючих речовин (лігандів) у ряду N,O,S-гетероциклічних сполук, синтез комплексних сполук ренію, дослідження їх можливості подальшого використання у медичній практиці. Розроблено методики синтезу нових 2-(3-R-1,2,4-триазол-5-іл)анілінів через нуклеофільне розщеплення s-триазоло[c]хіназолінів, як ефективних лігандів для створення комплексів з ренієм. Проведено теоретичні (молекулярний докінг) та експериментальні in vitro дослідження протипухлинної активності 2-(3-R-1,2,4-триазол-5-іл)-анілінів і встановлено, що зазначені сполуки мають високу спорідненність до рецепторів тирозинкіназ (EGFR та RET) і ефективно інгібують клітинні лінії недрібноклітинного раку легень. Створено низку нових лігандів через злиття аліциклічних сполук із різноманітними «фармакофорним» фрагентами. Синтезовано цис-тетрахлортетрабензимідазолдиреній(III) хлорид і тетрабензімідазолдиоксореніум(IV), вивчено будову та спектральні характеристики зазначених комплексів. Досліджено взаємодію цис-тетрахлортетрабензімідазолдиреній(III) хлори і тетрабензімідазолдиоксореніум(IV) з ДНК ckit1 G4, показано їх високу ефективність. Сфера використання - комбінаторна та медична хімії.

Реферат англійською:

Object of research - in silico and in vitro studies, modification and synthesis of N,O,S-heterocycles, ligands, dirhenium complexes, interaction with DNA and macrophages. The aim of the work is the targeted creation of new nucleotide-binding substances (ligands) in the series of N,O,S-heterocyclic compounds, synthesis of rhenium complexes, and study of their possible further use in medical practice. Methods for the synthesis of new 2-(3-R-1,2,4-triazol-5-yl)anilines by nucleophilic cleavage of s-triazolo[c]quinazolines as effective ligands for the creation of complexes with rhenium have been developed. Theoretical (molecular docking) and experimental in vitro studies of the antitumor activity of 2-(3-R-1,2,4-triazol-5-yl)-anilines were carried out and it was found that these compounds have a high affinity for tyrosine kinase receptors (EGFR and RET) and effectively inhibit non-small cell lung cancer cell lines. A number of new ligands were synthesized by fusing alicyclic compounds with various pharmacophore fragments. Cis-tetrachlorotetrabenzimidazole dirhenium(III) chloride and tetrabenzimidazole dioxorenium(IV) were synthesized, the structure and spectral characteristics of these complexes were studied. The interaction of cis-tetrachlorotetrabenzimidazolium dirhenium(III) chloride and tetrabenzimidazolium dioxorenium(IV) with ckit1 G4 DNA was investigated and their high efficiency was shown. The field of application is combinatorial and medicinal chemistry.

Індекс УДК: 546.12, 547.7/.8, 577.113;577.123;547.963.3

Коди тематичних рубрик: 31.17.15.33, 31.21.27, 31.23.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Оковитий Сергій Іванович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методики синтезу нових 2-(3-R-1,2,4-триазол-5-іл)анілінів як ефективних лігандів для створення комплексів з ренієм, а також методики синтезу нових комплексів – цис-тетрахлортетрабензимідазолдиреній(III) хлорид та тетрабензімідазолдиоксореніум(IV).

Назва НТП англійською: Methods for the synthesis of new 2-(3-R-1,2,4-triazol-5-yl)anilines as effective ligands for the creation of complexes with rhenium, as well as methods for the synthesis of new complexes - cis-tetrachlorotetrabenzimidazolium dirhenium(III) chloride and tetrabenzimidazolium dioxorenium(IV).

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Виробництво інших основних органічних хімічних речовин

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено оригінальні методики синтезу нових 2-(3-R-1,2,4-триазол-5-іл)анілінів шляхом нуклеофільного розщеплення s-триазоло[c]хіназолінів. Проведено теоретичні (молекулярний докінг) та експериментальні in vitro дослідження протипухлинної активності 2-(3-R-1,2,4-триазол-5-іл)-анілінів та встановлено, що зазначені сполуки мають високу спорідненність до рецепторів тирозинкіназ і ефективно інгібують клітинні лінії недрібноклітинного раку легень.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Комбінаторна та медична хімія, Науково-дослідні установи України

Перспективні ринки: Європейський Союз, Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Kozyriev Y. K. Synthesis of challenging 6-functionalized 1-oxaspiro[3.3]heptanes – new scaffolds for drug discovery / Y. K. Kozyriev, V. A. Palchykov // Tetrahedron Lett. – 2023. – Vol. 122. – article number 154515. https://doi.org/1 0.1016/j.tetlet.2023.154515.

Dil K. V. Rh-Catalyzed cyclization of carbamates – synthesis of a new heterocyclic system: tetrahydro-3H-4-oxa-2-thia-2b-azacyclopropa[cd]pentalen-3-one 2,2-dioxide / K. V. Dil, Y. K. Kozyriev, V. A. Palchykov // Chem. Papers. – 2023. – Vol. 77, № 11. – P. 7249–7254 https://doi.org/10.1007/s11696-023-03006-9.

Pylypenko O. O. Tautomeric behavior of 1,2,4-triazole derivatives: combined spectroscopic and theoretical study./ O. O. Pylypenko, S. I. Okovytyy, L. K. Sviatenko, E. O. Voronkov, K. P. Shabelnyk, S. I. Kovalenko // Struct Chem. – 2023. 34, 181–192. https://doi.org/10.1007/s11224-022-02057-0.

Antypenko L. Combined Application of Tacrolimus with Cyproconazole, Hymexazol and Novel {2-(3-R-1H-1,2,4-triazol-5-yl)phenyl}amines as Antifungals: In Vitro Growth Inhibition and In Silico Molecular Docking Analysis to Fungal Chitin Deacetylase. / Antypenko L., Meyer F., Sadyk Z., Shabelnyk K., Kovalenko S., Steffens K.G., Garbe L-A. // Journal of Fungi. – 2023. 9(1): 79. https://doi.org/10.3390/jof9010079.

Antypenko L. M. 5,6-Dihydrotetrazolo[1,5-c]quinazolines: toxicity prediction, synthesis, antimicrobial activity, molecular docking and perspectives. / Antypenko L.M., Antypenko O.M., Karnaukh I., Rebets O., Kovalenko S.I. // Archiv der Pharmazie, – 2023. e2300029. http://doi.org/10.1002/ardp.202300029.

Groma N. Evaluation of the toxicity and hepatoprotective properties of new S-substituted pteridins. / Groma N., Berest G., Antypenko O., Voskoboinik O., Kopiika V., Kovalenko S., Shvets V. // Current Issues in Pharmacy and Medical Sciences, – 2023. 36(1): 21-26. https://doi.org/10.2478/cipms-2023-0006.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Оковитий Сергій Іванович
д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Борисенко Ірина Олександрівна
(молодший науковий співробітник)

Гапонов Олександр Олексійович
(к. х. н., 02.00.03)

Діль Катерина Володимирівна
(молодший науковий співробітник)

Коваленко Сергій Іванович
(д.фарм.н., 15.00.02)

Оковитий Сергій Іванович
(д. х. н., 02.00.03)

Пальчиков Віталій Олександрович
(д. х. н., 02.00.03)

Пилипенко Олена Олексіївна

Штеменко Наталія Іванівна
(д.б.н., 03.00.04)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Терзі Н. В.

Телефон — +38 (097) 499-46-87

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

