

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U000286

Державний реєстраційний номер: 0123U100041

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Синтез естерів 2-(4-ізобутилфеніл)-пропіонової кислоти (ібупрофену), вивчення фізико-хімічних властивостей. Розробка умов та здійснення енантіоселективного гідролізу естерів 3-гідрокси-1,4-бенздіазепін-2-ону – перспективних сполук анксиолітичної і снодійної дії – та ібупрофену – нестероїдного протизапального засобу (НПЗЗ), який чинить спрямовану дію проти болю, жару, та запалення – за допомогою карбоксилестерази молюска *Rapana venosa* (рН, температура, термін проведення реакції гідролізу, співвідношення реагентів та ін.).

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О. В. Богатського Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження: Люстдорфська дорога, буд. 86, м. Одеса, Одеська обл., 65080, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380487662044

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 788.959
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження гідролітичних ензимних систем травних залоз молюска *Rapana venosa*, перспективних для створення біологічно активних сполук

Назва роботи англійською:

Study of hydrolytic enzyme systems of the digestive glands of the mollusk *Rapana venosa*, promising for the creation of biologically active compounds

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – цитозольна карбоксилестераза гепатопанкреаса *Rapana venosa*. Мета роботи – розробка умов та здійснення енантиоселективного гідролізу естерів 3-гідрокси-1,4-бенздіазепін-2-ону – перспективних сполук анксиолітичної і снодійної дії – та ібупрофену – нестероїдного протизапального засобу (НПЗЗ), який чинить спрямовану дію проти болю, жару, та запалення – за допомогою карбоксилестерази молюска *Rapana venosa* (рН, температура, термін проведення реакції гідролізу, співвідношення реагентів та ін.). Розроблено спосіб виділення високостабільної карбоксилестерази з цитозольної фракції гепатопанкреаса *Rapana venosa*, визначено її молекулярну масу (57,2 кДа), субдиничну структуру, а також біохімічні та фізико-хімічні властивості. Належність отриманого ензиму до родини карбоксилестераз підтверджено повним інгібуванням його естеразної активності ди-(п-нітрофеніл)-фосфатом. Показано, що ензим зберігає високу естеразну активність (більше 50 %) навіть після двох тижнів використання в інкубаційному середовищі. Досліджено деякі особливості субстратної специфічності карбоксилестерази цитозольної фракції гепатопанкреаса *Rapana venosa* для розуміння його каталітичних властивостей. Визначення регіоселективності ензиму по відношенню до 1- і 2-нафтилацетату показало, що питома естеразна активність ензиму за 2-нафтилацетатом в 3,6 рази вища ніж за 1-нафтилацетатом. Гідролітична активність ензиму також була протестована на серії субстратів, включаючи естери ібупрофену та 3-гідрокси-1,4-бензодіазепін-2-ону; показано високу енантиоселективність карбоксилестерази *Rapana venosa* щодо естерів 3-гідрокси-1,4-бензодіазепін-2-ону

Реферат англійською:

Research object: The cytosolic carboxylesterase of the hepatopancreas of *Rapana venosa*. The aim of the work is to develop conditions and perform enantioselective hydrolysis of esters of 3-hydroxy-1,4-benzodiazepin-2-one—promising compounds with anxiolytic and sedative activity—and ibuprofen, a non-steroidal anti-inflammatory drug (NSAID) with targeted effects against pain, fever, and inflammation, using the carboxylesterase from the mollusk *Rapana venosa*. Conditions studied include pH, temperature, reaction duration, reagent ratio, and other factors. A method for isolating a highly stable carboxylesterase from the cytosolic fraction of the hepatopancreas of *Rapana venosa* was developed. The enzyme's molecular weight (57.2 kDa), subunit structure, biochemical, and physicochemical properties were determined. The classification of the isolated enzyme as part of the carboxylesterase family was confirmed by complete inhibition of its esterase activity using di-(p-nitrophenyl)-phosphate. It was shown that the enzyme retains high esterase activity (over 50%) even after two weeks of use in the incubation medium. Certain features of the substrate specificity of the carboxylesterase from the cytosolic fraction of the hepatopancreas of *Rapana venosa* were studied to understand its catalytic properties. The regioselectivity of the enzyme towards 1- and 2-naphthyl acetate was determined, revealing that the specific esterase activity of the enzyme for 2-naphthyl acetate is 3.6 times higher than for 1-naphthyl acetate. The hydrolytic activity of the enzyme was also tested on a series of substrates, including esters of ibuprofen and 3-hydroxy-1,4-benzodiazepin-2-one. High enantioselectivity of *Rapana venosa* carboxylesterase towards esters of 3-hydroxy-1,4-benzodiazepin-2-one was demonstrated.

Індекс УДК: 577.15, 577.152.31/577.112.083/577.152.199.1

Коди тематичних рубрик:62.37.43.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Декіна Світлана Сергіївна

Науковий ступінь: д. б. н.

Вчене звання: с.д.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Біокаталізатор енантіоселективного синтезу біологічно активних речовин

Назва НТП англійською: Biocatalyst for the Enantioselective Synthesis of Biologically Active Substances

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Хімічна промисловість

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено спосіб виділення високостабільної карбоксилестерази з цитозольної фракції гепатопанкреаса *Rana venosa*, визначено її молекулярну масу (57,2 кДа), субодиничну структуру, а також біохімічні та фізико-хімічні властивості. Показано високу енантіоселективність карбоксилестерази *Rana venosa* щодо естерів 3-гідрокси-1,4-бензодіазепін-2-ону.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Підприємства медичної галузі

Перспективні ринки: Україна

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

Shesterenko Ye. et al. Pig Liver Cytosolic Carboxylesterase 1 and Its Inhibition by Remdesivir and Sofosbuvir // ChemistrySelect. – 2024. – V. 9, № 36. – P. e202305224. DOI: 10.1002/slct.202305224

Шестеренко Є.А., Шестеренко Ю.А., Рудненко А.А., Телятнікова Є.П., Декіна С.С. Біокатазізатор на основі карбоксилестерази гепатопанкреаса *Rana venosa* // XXVI Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії. Ужгород 16-20 вересня 2024 р, С. Д-34.

Рудненко А.А., Шестеренко Є.А., Декіна С.С. Отримання та властивості карбоксилестерази гепатопанкреаса *Rapana venosa* // XXVI Українська конференція з органічної та біоорганічної хімії. Ужгород 16-20 вересня 2024 р, С. С-70

Yevgeniia Shesterenko, Anastasiia Rudnenko, Yuliia Shesterenko, Svitlana Dekina. Cytosolic Carboxylesterase from *Rapana venosa* hepatopancreas: Isolation, Properties, and Substrate Specificity. Invasive alien species impact and management in agriculture, forestry and aquaculture, 26-29 November 2024, Menemen, Izmir, Türkiye

Х. Заклучні відомості

Керівник юридичної особи

Кузьмін Віктор Євгенович

д. х. н., 05.14.06

Перелік осіб-виконавців

Іллюшко Наталія Олександрівна

Декіна Світлана Сергіївна

(д. б. н.)

Топтіков Валентин Анатолійович

(к. б. н.)

Шестеренко Євгенія Аркадіївна

(к. б. н.)

Шестеренко Юлія Аркадіївна

(к. б. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Іллюшко Н. О.

Телефон

+38 (067) 724-39-55

Реєстратор

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

