

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U033114

Державний реєстраційний номер: 0124U001924

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розробка нових QSAR-моделей для прогнозування активності та синтез нових хімічних сполук гетероциклічної природи як антиракових агентів.

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442960409, 380445732552

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1608.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Прогнозування біоактивності та створення сучасних підходів до синтезу гетероциклічних сполук для потреб фармацевтичної промисловості. Розділ 2. Розробка нових QSAR-моделей для прогнозування активності і синтезу нових хімічних сполук гетероциклічної природи як антимікробних, протівірусних та протиракових агентів.

Назва роботи англійською:

Prediction of bioactivity and creation of modern approaches to the synthesis of heterocyclic compounds for the needs of the pharmaceutical industry. Chapter 2. Development of new QSAR models for activity prediction and synthesis of new chemical compounds of heterocyclic nature as antimicrobial, antiviral and anticancer agents.

Реферат українською:

На основі бази даних класів хімічних сполук як інгібіторів *E. coli* побудовано ряд нових QSAR-моделей. Це дозволило ідентифікувати цільові сполуки як високо активні антибактеріальні, протівірусні та протиракові агенти. Була оцінена протівірусна активність проти HCMV *in vitro* нових сульфамідних похідних. Знайдено, що найбільш перспективною біомішенню, асоційованою з HCMV, для похідних 1,3-оксазолу та 1,3-тіазолу є ДНК полімераза. Описано ряд іонних рідин (IP) на основі імідазолію, а також лізозомотропні детергенти на основі імідазолу, передбачених розробленими QSAR-моделями як протиракові агенти. Синтезовано і проведено скринінг проти ракових клітинних ліній NCI 60 для нових серій N-(4-ціано-1,3-оксазол-5-іл)сульфонамідів та 2,4-ди-сульфонілзаміщених 5-амінотіазолів. Експериментальне вивчення та аналіз п'яти-членних азотистих гетероциклів як антимікробних та протівірусних агентів засвідчило перспективність подальших досліджень у напрямку їх структурної оптимізації та розширення спектру біологічних досліджень.

Реферат англійською:

Based on the database of chemical compound classes as inhibitors of *E. coli*, a number of new QSAR models were constructed. This allowed the identification of target compounds as highly active antibacterial, antiviral and anticancer agents. The antiviral activity against HCMV *in vitro* of new sulfamide derivatives was evaluated. It was found that the most promising biotarget associated with HCMV for 1,3-oxazole and 1,3-thiazole derivatives is DNA polymerase. A number of imidazolium-based ionic liquids (ILs) and imidazole-based lysosomotropic detergents predicted by the developed QSAR models as anticancer agents are described. A new series of N-(4-cyano-1,3-oxazol-5-yl)sulfonamides and 2,4-disulfonyl-substituted 5-aminothiazoles were synthesized and screened against NCI 60 cancer cell lines. Experimental study and analysis of five-membered nitrogen heterocycles as antimicrobial and antiviral agents demonstrated the promise of further research in the direction of their structural optimization and expansion of the spectrum of biological research.

Індекс УДК: 547.64, 547.73, 547.8

Коди тематичних рубрик: 31.21.25.09, 31.21.27.05, 31.21.27.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Броварець Володимир Сергійович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: професор, чл-кор.НАН України

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові азотовмісні гетероциклічні сполуки як перспективні антимікробні, антивірусні та антиракові агенти.

Назва НТП англійською: New nitrogen-containing heterocyclic compounds as promising antimicrobial, antiviral and anticancer agents.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Установи НАН України та освіти, охорона здоров'я, сільське господарство

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створено нові QSAR-моделі на основі бази даних ряду гетероциклічних сполук. Були ідентифіковані цільові сполуки як високо активні антибактеріальні, протівірусні та протиракові агенти. Була оцінена протівірусна активність проти HCMV in vitro нових сульфамідних похідних. Знайдено, що найбільш перспективною біомішенню, асоційованою з HCMV, для похідних 1,3-оксазолу та 1,3 тіазолу є ДНК полімераза. Описано ряд іонних рідин (IP) на основі імідазолію, а також лізозомотропні детергенти на основі імідазолу, передбачених розробленими QSAR-моделями як протиракові агенти. Синтезовано і проведено скринінг проти ракових клітинних ліній NCI 60 для нових серій N-(4-ціано-1,3-оксазол-5-іл)сульфонамідів та 2,4 ди-суль-фонілзаміщених 5-амінотіазолів. Експериментальне вивчення та аналіз п'яти-членних азотистих гетероциклів як антимікробних та протівірусних агентів засвідчило перспективність подальших досліджень у напрямку їх структурної оптимізації та розширення спектру біологічних досліджень.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих, Створення сучасних підходів до синтезу гетероциклічних сполук для потреб фарміндустрії.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Науковці у галузі органічної хімії та медичної хімії, виробники ліків.

Перспективні ринки: Україна, країни Євросоюзу, США

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):

ІХ. Бібліографічний опис

1. Semenyuta I., Hodyna D., Kovalishin V., Demydchuk B., Pilyo S., Metelytsia L. 5-Amino-4-cyano-1,3-oxazoles as new antibacterials against antibiotic-resistant *Escherichia coli* strains. *Scientific practice: Modern and classical research methods*. May 26, 2023. Boston, USA. P. 117–121. doi: 10.36074/logos-26.05-2023
2. Hodyna D.M., Kovalishin V.V., Derevianko K. Yu. 1,3-Oxazole derivatives as antibacterials against colistin-resistant *Acinetobacter Baumannii* strains. *The process and dynamics of the scientific path. IV International Scientific and Theoretical Conference*. 16 June, 2023, Athens, Hellenic Republic: European Scientific Platform. P. 83–85. doi: 10.3674/scientia-16.06.2023
3. Zhirnov V., Shablykin O., Chumachenko S., Kornii Y., Keith K.A., Harden E.A., Hartline C.B., James S.H., Kobzar O., Kovalishyn V., Vovk A., Brovarets V. In vitro activity of novel 4-iminohydantoin sulfamide derivatives against human cytomegalovirus. *Chem Papers*. Chem. Papers. 2023. <https://doi.org/10.1007/s11696-023-03038-1>
4. Kovalishyn V., Severin O., Kachaeva M., Semenyuta I., Keith K.A., Harden A., Hartline C.B., James S.H., Metelytsia L., Brovarets V. Design and experimental validation of the oxazole and thiazole derivatives as potential antivirals against of human cytomegalovirus. *SAR QSAR Environ Res*. 2023 Jul-Sep. Vol. 34 (7). P. 523–541. doi: 10.1080/1062936X.2023.2232992
5. Severin O.O., Kachaeva M.V., Pilyo S.G., Kovalishyn V.V., Keith K.A., Harden E.A., Hartline C.B., James S.H., Zhirnov V.V., Brovarets V.S. Synthesis, characterization and study of anti-HPV activity and cell cytotoxicity of novel 1,3-oxazole-4-carbonitrile and 4-sulfonylamide-5-phenyl-1,3-thiazole derivatives in vitro. *Letters in Applied Nanobioscience*. 2024. Vol. 13 (2). P. 89. doi: 10.33263/LIANBS132.089
6. Gryniukova A., Borysko P., Myziuk I., Aliksieieva D., Hodyna D., Semenyuta I., Kovalishyn V., Metelytsia L., Rogalsky S., Tcherniuk S. Anticancer activity features of imidazole-based ionic liquids and lysosomotropic detergents: in silico and in vitro studies. *Mol. Divers*. 2024. DOI: 10.1007/s11030-023-10779-4
7. Semenyuta I., Hodyna D., Gryniukova A., Rogalsky S., Metelytsia L. "Long-chain N-substituted imidazole derivatives with anticancer activity against chronic myeloid leukemia". *Collection of scientific papers «ГЛО»*, (March 29, 2024; Cambridge, UK), 175–180. VI International Scientific and Practical Conference "Education and Science of Today: Intersectoral Issues and Development of Sciences" (Cambridge, UK, 2024). <https://doi.org/10.36074/logos-29.03.2024.041>
8. Semenyuta I., Hodyna D., Gryniukova A., Rogalsky S., Metelytsia L. Antitumor activity of long-chain N-substituted 3-methylimidazolium ionic liquids against neuroblastoma cancer cells. *Grail of Science*, (39), 288–291. VII International Scientific and Practical Conference "Globalization of Scientific Knowledge: International Cooperation and Integration of Sciences" (Vinnytsia, Ukraine – Vienna, Austria, 2024). <https://doi.org/10.36074/grail-of-science.10.05.2024>
9. Severin O., Pilyo S., Kachaeva M., Zhirnov V., Hodyna D., Bahrieieva O., Brovarets V. Synthesis, characterization of novel N-(4-cyano-1,3-oxazol-5-yl)sulfonamide derivatives and in vitro screening their activity against NCI-60 cancer cell lines. *ChemMedChem*. 2024. Vol. 19, Issue 5. e202300527. <https://doi.org/10.1002/cmdc.202300527>
10. Zhabrev V., Demydchuk B., Pilyo S., Zhirnov V., Liavynets O., Brovarets V. Synthesis, characterization, and in vitro anticancer evaluation of 2,4-disulfonyl-substituted 5-aminothiazoles. *Curr. Chem. Lett*. 2024. DOI: 10.5267/j.ccl.2024.2.003

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Броварець Володимир Сергійович

д.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Багреева Оксана Сергіївна

Година Діана Миколаївна

(к.б.н., 02.00.10)

Головченко Олександр Володимирович

(к. х. н., 02.00.10)

Демидчук Богдан Андрійович

(к.х.н., 02.00.03)

Дерев'янка Катерина Юріївна

Жирнов Віктор Валентинович

(д. мед. н., 14.03.06)

Зябров Володимир Стефанович

(к.х.н., 02.00.03)

Качаєва Марина Володимирівна

(к.х.н., 02.00.10)

Ковалішин Василь Володимирович

(к.х.н., 02.00.10)

Метелиця Лариса Олексіївна

(д. б. н., 02.00.10)

Москвіна Вікторія Сергіївна

(к. х. н., 02.00.03)

Мітюхін Олег Петрович

(к.х.н., 02.00.06)

Порхун Світлана Василівна

Пільо Степан Григорович

(к. х. н., 02.00.03)

Северін Олександр Олегович

(д.філософ)

Семенюта Іван Володимирович

(к.б.н., 02.00.10)

Чумаченко Світлана Анатоліївна

(к.х.н., 02.00.10)

Відповідальний за підготовку

Бондаренко О.М.

облікових документів

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

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

