

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U005246

Державний реєстраційний номер: 0125U001413

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез та дослідження нових фосфоровмісних похідних азолівта продуктів розщеплення циклу як нових протипухлинних агентів

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього документа: Проміжний 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, Київ, 02094, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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, Київ, 01601, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - Договір (замовлення) з міністерством, іншим центральним органом виконавчої влади, академією наук (головним розпорядником бюджетних коштів на проведення ДіР)

Напрямок фінансування: 2.1 - Фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - Кошти загального фонду державного бюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541230

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 700.000
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дизайн, синтез, *in silico* та *in vitro* вивчення похідних азолів як потенційних протипухлинних агентів.

Назва роботи англійською:

Design, synthesis, *in silico* and *in vitro* studies of azole derivatives as potential anticancer agents.

Реферат українською:

Ряд 1,3-оксазол-4-ілфосфонатів та 1,3-оксазол-4-карбонітрилів було синтезовано та оцінено їх протиракову активність. Два фосфонати показали селективність ($SI_r > 3$ за TGI та LC50) проти лейкемії, тоді як похідне 4-ціано-1,3-оксазолу було селективним проти раку нирок (індекс інгібування GI становив 63%), товстого кишківника (GI = 57%) та молочної залози (GI = 50%). Дія трьох найактивніших сполук може бути реалізована через взаємодію з канабіноїдним рецептором 2, аденозиновим рецептором A3 та циклінзалежною кіназою 2. В ряду 4-незаміщених, 4-фосфорильованих та 4-ціанозаміщених 1,3-оксазолів сполуки з акцепторними замісниками в положеннях 4 (P(O)(OEt)₂, CN) та 5 (S(O)Ar, SO₂Ar) оксазольного циклу пригнічують ріст ракових ліній панелі NCI-60, а сполуки з донорними замісниками -SR та -H у положеннях 4 і 5 практично не діють на ріст ракових клітин. Біоактивність 5-меркапто-1,3-оксазолів пов'язана з донорно-акцепторними властивостями молекул.

Реферат англійською:

A number of 1,3-oxazol-4-ylphosphonates and 1,3-oxazole-4-carbonitriles were synthesized and their anticancer activity was evaluated. Two phosphonates showed selectivity ($SI_r > 3$ by TGI and LC50) against leukemia, while the 4-cyano-1,3-oxazole derivative was selective against renal (GI inhibition index was 63%), colon (GI = 57%), and breast (GI = 50%) cancers. The action of the three most active compounds can be realized through interaction with cannabinoid receptor 2, adenosine receptor A3 and cyclin-dependent kinase 2. Among the 4-unsubstituted, 4-phosphorylated and 4-cyanosubstituted 1,3-oxazoles, compounds with acceptor substituents in positions 4 (P(O)(OEt)₂, CN) and 5 (S(O)Ar, SO₂Ar) of the oxazole ring inhibit the growth of cancer lines of the NCI-60 panel, and compounds with donor substituents -SR and -H in positions 4 and 5 have practically no effect on the growth of cancer cells. The bioactivity of 5-mercapto-1,3-oxazoles is associated with the donor-acceptor properties of the molecules.

Індекс УДК: 547.73, 547.9;577.1

Коди тематичних рубрик: 31.21.27.05, 31.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Качаєва Марина Володимирівна

Науковий ступінь: к.х.н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1517-4807

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Дизайн, синтез, in silico та in vitro вивчення похідних азолів як потенційних протипухлинних агентів, встановлення можливих механізмів дії, з'ясування залежності структура-активність.

Назва НТП англійською: Design, synthesis, in silico and in vitro study of azole derivatives as potential antitumor agents, establishment of possible mechanisms of action, elucidation of structure-activity relationships.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Біоорганічна хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Нові речовини – похідні азолів та продукти їх розщеплення, які проявляють протиракову активність, результати протиракового скринінгу сполук, ADMET аналізу, COMPARE аналізу, квантово-хімічних розрахунків, спрогнозовані механізми антиракової активності сполук.

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

Вплив НТП на довкілля: Не справляє шкідливого впливу.

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути, науково-виробничі лабораторії та навчальні заклади, що працюють в області створення нових ефективних біорегуляторів протиракової дії., Результати можуть бути використані для подальших досліджень у сучасних наукових та науково-виробничих процесах – у фармацевтиці, медицині, ветеринарії, а також в області органічного синтезу, біотехнологій. Окремі результати можуть бути впроваджені в навчальний процес університетів, програму дисциплін для аспірантів ІБОНХ ім. В.П. Кухаря.

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

1. Bahrieieva O. S., Kachaeva M. V., Kobzar O. L., Shulga Yu. V. , Golovchenko O. V., Golovchenko O. I., Nizhenkovska I. V., Mykhailenko O. V., Pilyo S. G., Zhirnov V. V., Brovarets V. S. Synthesis, Anticancer Screening, and Virtual Analysis of 5-S-Substituted Derivatives of 1,3-Oxazol-4-ylphosphonates and 1,3-Oxazole-4-carbonitriles. SynOpen 2025, 9, 268–281. DOI: 10.1055/a-2741-9575
2. Kachaeva M. V., Bahrieieva O.S., Kobzar O. L., Shulha Yu. V. , Kachkovsky O. D., Kozachenko O. P. , Pilyo S. G. , Brovarets V. S. Oxazoles as potential anticancer agents: synthesis, in vitro, in silico studies and structure-activity relationship. Letters in Organic Chemistry. – 2025.
3. Bahrieieva O., Golovchenko O., Golovchenko O., Brovarets V. Synthesis of Novel 4-Phosphorylated Derivatives of 5-Mercapto-1,3-Oxazole as Potential Anticancer Agents. XXVI International Symposium “Advances in the Chemistry of Heteroorganic Compounds” Łódź, November 21, 2025 P-091.
4. Багрєєва О.С., Головченко О.В., Качаєва М.В., Головченко О.І., Броварець В.С. Синтез нових 4-фосфорильованих похідних 5-меркапто-1,3-оксазолу – потенційних протиракових агентів. XX Наукова конференція “Львівські хімічні читання – 2025”, Львів, 2–4 червня 2025 року – Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2025. – О40.
5. Kachaeva M.V., Bahrieieva O.S., Shulha Y.V., Kobzar O.L., Pilyo S.G., Kachkovsky O.D., Brovarets V.S. Quantumchemical modeling and in vitro anticancer evaluation of 5-mercaptooxazoles. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали - 2025 : колективна монографія / за загальною ред. Колодяжної А.О. – Київ: Інтерсервіс, 2025. С. 14–19. DOI: 10.15407/book23-978-966-999-557-5.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попільніченко Сергій Валентинович
к.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Багрєєва Оксана Сергіївна

Кобзар Олександр Леонідович
(к.х.н., 02.00.10)

Шульга Юрій Васильович
(д.філософ, 102)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Бондаренко Ольга Миколаївна

Телефон

(044)573-27-01

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна