

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U002635

Державний реєстраційний номер: 0125U001851

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-03-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дизайн комбінаторної бібліотеки нових похідних азагетероциклів, молекулярний докінг, прогноз фармакокінетичних та токсикометричних характеристик та синтез найбільш перспективних сполук

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Вид звітнього 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 Науки, буд. 72, м. Дніпро, Дніпровський р-н., Дніпропетровська обл., 49045, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380563749801, 380563749822

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 Берестейський, 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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201390

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1080.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові азагетероцикли: молекулярний дизайн, синтез, перспективи застосування для фармакокорекції посттравматичних стресових розладів і метаболічного синдрому

Назва роботи англійською:

New azaheterocycles: molecular design, synthesis, prospects for application for pharmacocorrection of post-traumatic stress disorders and metabolic syndrome

Реферат українською:

У рамках науково-дослідної роботи створено комбінаторну бібліотеку нових азотовмісних гетероциклічних сполук та проведено їх детальний аналіз за допомогою сучасних комп'ютерних методів (молекулярний докінг, прогноз фармакокінетики та токсичності). Розроблено ефективні методи синтезу раніше невідомих класів сполук, таких як спіро-триазоло-хіназоліни, триазоло-триазини, фероценілпіридазини, тієнотіопіранові системи та біциклічні азасполуки. Виявлено перспективні речовини з вираженою біологічною активністю: модулятори ферменту DGK- α для боротьби з раком та імунними порушеннями, ноотропні та анксиолітичні агенти для покращення когнітивних функцій, потужні гепатопротектори, що перевищують відомий препарат тіотриазолін, гіпоглікемічні засоби для лікування діабету, багатоцільові нейропротектори для хвороби Паркінсона з супутньою депресією. Синтез проводився з використанням доступних реактивів, «зелених» технологій (мікрохвильова активація, фотохімія, однореакторні реакції), що робить методи економічними та екологічними. Отримані сполуки мають сприятливий профіль безпеки (низька токсичність, добра біодоступність) та підтверджену активність у лабораторних тестах на клітинних лініях і тваринних моделях. Результати відкривають шлях до створення нових вітчизняних ліків для лікування поширених захворювань, включаючи наслідки стресу та травм, що особливо актуально для реабілітації ветеранів.

Реферат англійською:

Within the research project, a combinatorial library of novel nitrogen-containing heterocyclic compounds was created and thoroughly analyzed using modern computational methods (molecular docking, prediction of pharmacokinetics and toxicity). Efficient synthetic methods were developed for previously unknown classes of compounds, such as spiro-triazolo-quinazolines, triazolo-triazines, ferrocenylpyridazines, thienothiopyran systems, and bicyclic aza-compounds. Promising substances with pronounced biological activity were identified: modulators of the DGK- α enzyme for combating cancer and immune disorders; nootropic and anxiolytic agents for improving cognitive functions; potent hepatoprotectors surpassing the known drug thiotriazoline; hypoglycemic agents for diabetes treatment; multitarget neuroprotectors for Parkinson's disease accompanied by depression. Synthesis was carried out using accessible reagents and "green" technologies (microwave activation, photochemistry, one-pot reactions), making the methods cost-effective and environmentally friendly. The obtained compounds exhibit a favorable safety profile (low toxicity, good bioavailability) and confirmed activity in laboratory tests on cell lines and animal models. The results pave the way for developing new domestic medicines for treating common diseases, including the effects of stress and trauma, which is particularly relevant for veteran rehabilitation.

Індекс УДК: 547.7/.8

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

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: «Сполуки-лідери» з нейропротекторною та гепатопротекторною активністю

Назва НТП англійською: «Leade-compounds» with neuroprotective and hepatoprotective activity

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Хімія; Фармація; Медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблені методи синтезу нових азагетероциклів з попереднім використанням раціонального дизайну та in vivo скринінгу дозволили виявити ряд «сполук-лідерів» з високою нейропротекторною (ноотропна, анксиолітична), гепатопротекторною активністю. Модифікація похідної птеридину шляхом покращення фармако-технологічних характеристик дозволили створити «сполуку-лідер», динатрій 3-(2-((карбоксилатометил)гіо)-4,7-діоксо-3,4,7,8-тетрагідроптеридин-6-іл)пропіонат, яка значно знижує гострі гепатотоксичні ефекти, спричинені тетрахлорметаном, про що свідчать зниження рівня перекисного окислення ліпідів та прооксидантних маркерів, нормалізація біохімічних маркерів печінки, регенерація архітектури печінки, обмеження запальних ефектів, зниження маркерів Nrf2 та Ліпокалін-2 та індукція печінкових антиоксидантних ферментів. Створені нові 2'-R-6'H-спіро(циклоалкіл-, гетероцикліл-)-[1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназоліни, з урахуванням структурних особливостей відомих ноотропних і анксиолітичних препаратів, показали високу ефективність на моделі когнітивних порушень, спричинених кетаміном у щурів. Проведено вивчення гострої токсичності, алергогенності та шкірно-подразнюючої дії для «сполуки-лідера», яка перевищувала референс-сполуки: пірацетам та фабомотизол.

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

Вплив НТП на довкілля: Не впливає

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

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):

ІХ. Бібліографічний опис

1. Shabelnyk K., Fominichenko A., Antypenko O., Gaponov O., Kopteva S., Shyshkina S., Voskoboinik O., Okovytyy S., Kovalenko S., Oksenykh V., Kamyshnyi O. Antistaphylococcal Triazole-Based Molecular Hybrids: Design, Synthesis and Activity. *Pharmaceuticals*. 2025, 18(1), 83. <https://doi.org/10.3390/ph18010083>. Impact Factor: 4.9. Набір FAIR-даних до цієї роботи розміщено за посиланням <https://www.mdpi.com/article/10.3390/ph18010083/s1>.
2. Antypenko L., Shabelnyk K., Antypenko O., Arisawa M., Kamyshnyi O., Oksenykh V., Kovalenko S. In Silico Identification and Characterization of Spiro[1,2,4]triazolo[1,5-c]quinazolines as Diacylglycerol Kinase π -Modulators. *Molecules* 2025, 30, 2324. <https://doi.org/10.3390/molecules30112324>. Impact Factor: 4.98 (Scopus, Q1). Набір FAIR-даних до цієї роботи розміщено за посиланням <https://www.mdpi.com/article/10.3390/molecules30112324/s1>.
3. Lohvinenko N., Shvets V., Antypenko O., Voskoboinik O., Bozhkov A., Maslak H., Oksenykh V., Kamyshnyi O., Okovytyy S., Kovalenko S. The Application of S-Substituted Pteridine for CCl₄-Induced Acute Hepatitis Treatment in Rats. *Biomedicines* 2025, 13(6), 1276. <https://doi.org/10.3390/biomedicines13061276>. Impact Factor: 4.7 (Scopus, Q1).
4. Trzhetsynskyi S., Nosulenko I., Kinichenko A., Skoryna D., Berest H., Shvets V., Voskoboinik O., Kovalenko S., Petakh P., Kamyshnyi O. Future horizons in diabetes treatment: hypoglycemic activity of [1,2,4]triazino[2,3-c]quinazoline derivatives. *Front. Endocrinol.* 2025, 16, 1638013. <https://doi.org/10.3389/fendo.2025.1638013>. Impact Factor: 4.6 (Scopus, Q1). Набір FAIR-даних до цієї роботи розміщено за посиланням <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fendo.2025.1638013/full#supplementar>
5. Tymoshenko K.I., Shishkina S.V., Palchykov V.A. Ferrocene-containing tetrahydropyridazines via domino chemistry. *J. Mol. Str.* 2025, 1337, 142145. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2025.142145> Impact Factor: 4.7 (Scopus, Q1). Набір FAIR-даних до цієї роботи розміщено за посиланням <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/67aa0e7afa469535b9beda77>.
6. Palchykov V.A. Visible light-mediated synthesis of 1,3-benzothiazoles: A comprehensive review. *Coord. Chem. Rev.* 2025, 537, 216677. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2025.216677>. Impact Factor: 23.5 (Scopus, Q1) Набір FAIR-даних до цієї роботи розміщено за посиланням <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/67419448f9980725cf917676>.
7. Tymoshenko K.I., Palchykov V.A. Harnessing ferrocenecarboxaldehyde in multicomponent reactions for the synthesis of bioactive heterocyclic ferrocenes *J. Chem. Technol.* 2025, 33(3), 570-578. <https://doi.org/10.15421/jchemtech.v33i3.336225> CiteScore: 0.9 (Scopus, Q4) Набір FAIR-даних до цієї роботи розміщено за посиланням <https://chemrxiv.org/engage/chemrxiv/article-details/68811193fc5f0acb529add8b>.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Оковитий Сергій Іванович

д. х. н., 02.00.03

Перелік осіб-виконавців

Беленічев Ігор Федорович

(д.б.н., професор, 14.03.05)

Дідур Олег Олексійович

(к. б. н., с.д., 03.00.16)

Коваленко Сергій Іванович

(д.фарм.н., професор, 15.00.02)

Полонський Володимир Анатолійович

(к.х.н., доц., 02.00.05)

Синявський Сергій Вікторович

Тимошенко Кирило Ігорович

Швець Володимир Миколайович

(д. б. н., професор, 03.00.04)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Карась Людмила Миколаївна

Телефон

+380504543093

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна