

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U005245

Державний реєстраційний номер: 0124U002114

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-12-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Синтез та дослідження протиракової та антимікробної активності нових похідних 5-аміно-, 5-арилсульфаніл- та 5-арилсульфоніл-1,3-оксазолів, оксазолосулфонамідів та бісоксазолів

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

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, 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:

Нові синтетичні азотовмісні гетероциклічні сполуки з антимікробною та протираковою активністю

Назва роботи англійською:

Novel synthetic nitrogen-containing heterocyclic compounds with antimicrobial and anti-cancer activity

Реферат українською:

Було проведено QSAR-дослідження для оцінки серії 1,3-оксазолів як інгібіторів *E. coli*. Ряд нових похідних 5-аміно-4-ціано-1,3-оксазолу, прогнозованих як найбільш активні, були синтезовані та охарактеризовані за допомогою ІЧ, ¹H, ¹³C ЯМР спектроскопії, елементного аналізу та хромато-мас-спектрометрії. In vitro результати досліджень показали, що похідні 5-аміно-4-ціано-1,3-оксазолу проявили високу антибактеріальну активність зі значеннями мінімальної інгібуючої концентрації (MIC) 8-64 мкг/мл проти колістин-резистентних ізолятів *E. coli* та *S. aureus*. Більше того, досліджені сполуки виявилися інгібіторами глутатіон-S-трансферази A1-1 зі значеннями IC₅₀ у мікромольному діапазоні. Результати молекулярного докінгу продемонстрували, що сполуки здатні зв'язуватися з активним центром ферменту. Результати цитотоксичності щодо ліній ракових клітин L20B та RD показали, що тестовані сполуки продемонстрували значний цитостатичний ефект, зі значеннями CD₅₀ від 0,02 до 2 мкг/мл. Результати гострої токсичності сполук щодо біосенсора *D. magna* засвідчили помірну токсичність найбільш перспективних сполук. Крім того, було синтезовано нові заміщені 4-ціано-N-(4-ціано-1,3-оксазол-5-іл)-N-алкіл-1,3-оксазол-5-сульфоніаміди, які у тестах in vitro продемонстрували протиракову активність у діапазоні значень LC₅₀ 1-100 мкМ проти ліній ракових клітин лейкемії, недрібноклітинного раку легень, меланоми та раку товстої кишки. Результати досліджень потенційних молекулярних механізмів дії цих сполук за допомогою методів молекулярного докінгу показали найвищу спорідненість до тубуліну та циклінзалежних кіназ. Також, експериментально встановлено, що синтезовані 5-арилсульфанільні, 5-арилсульфонільні та 5-сульфоніамідні похідні 1,3-оксазолу проявили помірний протигрибковий ефект проти грибів роду *Candida*. Таким чином, досліджені похідні 1,3-оксазолу становлять перспективний клас сполук для подальших досліджень як потенційних протиракових та антимікробних засобів.

Реферат англійською:

QSAR study was conducted to evaluate a series of 1,3-oxazoles as inhibitors of *E. coli*. A number of new 5-amino-4-cyano-1,3-oxazole derivatives predicted to be the most active were synthesized and characterized by IR, ¹H, ¹³C NMR spectroscopy, elemental analysis, and chromatography-mass spectrometry. In vitro results showed that 5-amino-4-cyano-1,3-oxazole derivatives exhibited high antibacterial activity with minimum inhibitory concentration (MIC) values of 8-64 µg/mL against colistin-resistant isolates of *E. coli* and *S. aureus*. Moreover, the studied compounds were found to be inhibitors of glutathione-S-transferase A1-1 with IC₅₀ values in the micromolar range. Molecular docking results demonstrated that the compounds were able to bind to the active site of the enzyme. The results of cytotoxicity against L20B and RD cancer cell lines showed that the tested compounds demonstrated a significant cytostatic effect, with CD₅₀ values from 0.02 to 2 µg/ml. The results of acute toxicity of the compounds against the *D. magna* biosensor showed moderate toxicity of the most promising compounds. In addition, novel substituted 4-cyano-N-(4-cyano-1,3-oxazol-5-yl)-N-alkyl-1,3-oxazole-5-sulfonylamides were synthesized, and demonstrated anticancer activity in vitro with LC₅₀ values ranging from 1 to 100 µM against leukemia, non-small cell lung cancer, melanoma and colon cancer cell lines. The results of studies of the potential molecular mechanisms of action of these compounds using molecular docking methods showed the highest affinity for tubulin and cyclin-dependent kinases. It was also experimentally established that the synthesized 5-arylsulfanyl, 5-arylsulfonyl and 5-sulfonylamide derivatives of 1,3-oxazole exhibited moderate antifungal effect against fungi of the genus *Candida*. Thus, the studied 1,3-oxazole derivatives constitute a

promising class of compounds for further research as potential anticancer and antimicrobial agents.

Індекс УДК: 547.7/.8, 615.281:577.1, 615.9::574, 57:007].001.57, 57.082

Коди тематичних рубрик: 31.21.27, 31.27.22, 34.47.51, 34.55.15, 34.05.33

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Година Діана Миколаївна

Науковий ступінь: к.б.н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6161-9833

Додаткова інформація:

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути, науково-виробничі лабораторії та навчальні заклади, що працюють в області створення нових ефективних біорегуляторів антимікробної та протиракової дії.

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:

ІХ. Бібліографічний опис

1. М.В. Качаєва, Д.М. Година, Ю.В. Шульга, О.О. Северін, С.Г. Пільо, В.С. Броварець. Дослідження протигрибкової та антибактеріальної активності 5-арилсульфаніл-, 5-арилсульфоніл-1,3-оксазолів та оксазоло-5-сульфонамідів. Матеріали ІХ всеукраїнської наукової конференції «Актуальні задачі хімії: дослідження та перспективи», 9 квітня 2025 року, Житомир: Житомирський державний університет імені Івана Франка, С. 219-222.
2. D. Hodyna, O. Bahrieieva, Y. Shulga, V. Kovalishyn, O. Golovchenko, O. Golovchenko, M. Kachaeva, S. Pilyo, O. Trokhimenko, L. Metelytsia, V. Brovarets. In Silico and In Vitro Studies of 1,3-Oxazol-4-yl Phosphonium Salts as Dual-Functional Antibacterial and Anticancer Agents. *Chemistry Select.* 2025. Vol. 10. e00282. <https://doi.org/10.1002/slct.202500282>.
3. O. Severin, S. Pilyo, M. Kachaeva, D. Godyna, V. Brovarets. Synthesis and study of the anticancer activity of new sulfonylamides with two azole cycles. Збірник наукових праць: XX Наукова конференція "Львівські хімічні читання – 2025", Львів, 2–4 червня 2025 року, Львів: ЛНУ імені Івана Франка, 2025. О46.
4. M. Kachaeva, S. Pilyo, D. Hodyna, Y. Shulga, V. Brovarets. Synthesis And Anticancer Activity Study Of New Bis-1,3-Oxazole-5-Sulfonylamides. *ChemMedChem*. DOI: 10.1002/cmdc.202500921.
5. D.M. Hodyna, M.V. Kachaeva, Y.V. Shulha, V.V. Kovalishyn, L.O. Metelytsia. In silico and in vitro evaluation of new 5-amino-4-cyano-2-undecyl-1,3-oxazole derivatives as antibacterials against human pathogen *Escherichia coli*. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали – 2025: колективна монографія / за загальною ред. Колодяжної А.О. – Київ: Інтерсервіс, 2025. С. 123-129.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попільніченко Сергій Валентинович

к.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Качаєва Марина Володимирівна

(к.х.н., 02.00.10)

Северін Олександр Олегович

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