

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U003644

Державний реєстраційний номер: 0118U007143

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-07-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Синтез, фізико-хімічні та біологічні властивості 3,4-дизаміщених 3(5)-тіо-1,2,4-тріазолу з антиоксидантною, антигіпоксичною, антимікробною, кардіо- та гепатопротекторною дією

Початок етапу: 11.2018

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Запорізький державний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010741

Місцезнаходження: проспект Маяковського, буд. 26, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69035, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380612246469

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Запорізький державний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010741

Місцезнаходження: проспект Маяковського, буд. 26, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69035, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380612246469

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 43 - власна ініціатива (якщо робота виконується з власної ініціативи за кошти виконавця НДР або безкоштовно)

Напрямок фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7704 - власні кошти, кошти підприємств, установ, організацій, фізичної особи на виконання ініціативних робіт

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 0.500

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Синтез, фізико-хімічні та біологічні властивості 3,4-дизаміщених 3(5)-тіо-1,2,4-тріазолу з антиоксидантною, антигіпоксичною, антимікробною, кардіо- та гепатопротекторною дією

Назва роботи англійською:

Synthesis, physico-chemical and biological properties of 3,4-disubstituted 3 (5) -thio-1,2,4-triazole with antioxidant, antihypoxic, antimicrobial, cardioprotective and hepatoprotective effects

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – розробка методів синтезу, дослідження реакційної здатності, хімічних, фізико-хімічних та біологічних властивостей нових похідних 4-R-5-R1-1,2,4-тріазол-3-тіону та продуктів його хімічного перетворення. Мета роботи – синтез нових біологічно активних сполук в ряду 1,2,4-тріазолу, дослідження їх фізико-хімічних та біологічних властивостей, встановлення закономірностей зв'язку між хімічною будовою і біологічною дією та впровадження в лікувальну практику нових ефективних засобів на основі похідних 1,2,4-тріазолу з протитуберкульозною активністю. Методи дослідження: хімічні методи (реакції алкілування, відновлення, естерифікації, нейтралізації, гідразинолізу, каталітичної конденсації, циклізації), фізико-хімічні методи (елементний аналіз, ІЧ-, ¹H ЯМР-спектроскопія, мас-спектрометрія, рентгеноструктурні дослідження, хроматографічні методи), хеометричні (квантово-хімічні розрахунки, молекулярний докінг, QSAR-аналіз, віртуальний скринінг, біодоступність), методи математичної статистики. Результати та їх новизна. Проведено молекулярний докінг до ферменту «EC 2.7.13.3 Histidine kinase» та «EC 3.1.3.1 Alkaline phosphatase», як потенційних мішеней для антибактеріальної активності. Розроблено методи синтезу похідних 4-R-5-R1-1,2,4-тріазол-3-тіонів, які можуть мати потенційно низьку токсичність та проявляють протимікробну і фунгіцидну активності. Вдосконалено методики одержання 4-R-5-R1-1,2,4-тріазол-3-тіонів із галогенпохідними сполуками, а також вивчено реакції подальших перетворень заміщених 1,2,4-тріазол-3-тіону із п-галогенкетонами. Оптимізовано методи синтезу відповідних тіонів, а також вперше синтезовано ряд S-алкілпохідних. Будова та індивідуальність отриманих сполук у всіх випадках підтверджена сучасними фізико-хімічними методами аналізу.

Реферат англійською:

The object of the research is the development of synthesis methods, the study of the reactivity, chemical, physicochemical and biological properties of new derivatives of 4-R-5-R1-1,2,4-triazole-3-thione and products of its chemical transformation. The purpose of the work is the synthesis of new biologically active compounds in the 1,2,4 triazole series, the study of their physicochemical and biological properties, the establishment of regularities of the relationship between chemical structure and biological action and the introduction into medical practice of new effective agents based on 1,2,4-triazole derivatives with anti-tuberculosis activity. Research methods: chemical methods (alkylation, reduction, esterification, neutralization, hydrazinolysis, catalytic condensation, cyclization reactions), physicochemical methods (elemental analysis, IR, ¹H NMR spectroscopy, mass spectrometry, X-ray structural studies, chromatographic methods), chemometric (quantum chemical calculations, molecular docking, QSAR analysis, virtual screening, bioavailability), mathematical statistics methods. Results and their novelty. Molecular docking was performed to the enzyme "EC 2.7.13.3 Histidine kinase" and "EC 3.1.3.1 Alkaline phosphatase" as potential targets for antibacterial activity. Methods for the synthesis of 4-R-5-R1-1,2,4-triazole-3-thione derivatives have been developed, which may have potentially low toxicity and exhibit antimicrobial and fungicidal activity. Methods for the preparation of 4-R-5-R1-1,2,4-triazole-3-thione with halogenated compounds have been improved, and reactions of subsequent transformations of substituted 1,2,4-triazole-3-thione with p-haloketones have been studied. Methods for the synthesis of the corresponding thiones have been optimized, and a number of S-alkyl derivatives have been synthesized for the first time. The structure and individuality of the

obtained compounds in all cases have been confirmed by modern physicochemical methods of analysi

Індекс УДК: 547.7/.8, 547.792'286.2'857.4.057-116.03/.04:615.31.015.4

Коди тематичних рубрик: 31.21.27

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Панасенко Олександр Іванович

Науковий ступінь: д. фармац. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи синтезу нових біологічно активних сполук в ряду 1,2,4 триазолу

Назва НТП англійською: Methods of synthesis of new biologically active compounds in the 1,2,4 triazole series

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: фармація

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено методи синтезу похідних 4-R-5-R1-1,2,4-триазол-3-тіонів, які можуть мати потенційно низьку токсичність та проявляють протимікробну і фунгіцидну активності.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2022

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):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Пат. на корисну модель 133298 Україна, МПК (2006) C07D 249/00 C07D 295/00 A01P 21/00 A61K 31/00.

Застосування амоній 2-((4-аміно-5- (морфолінометил)-4Н-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)ацетату як стимулятора росту коренів у живців актинідії / Є. Г. Книш, О. І. Панасенко, Р. О. Щербина, Н. О. Хромих, Ю. В. Лихолат. № u2018 11401 ; заявл. 19.11.18 ; опубл. 25.03.19, Бюл. № 6.

Karpenko Yu. V., Panasenko O. I. Search for antibacterial activity in a number of new S-derivatives (1,2,4-triazole-3(2H)-yl)methyl)thiopyrimidines. Актуальні питання фармац. і мед. науки та практики. 2021; 14 (2), 173–178. DOI:

Синтез та хімічні перетворення 5-гетерил-4R-1,2,4-триазол-3(2H)-тіонів: монографія / Ю.В. Карпенко, О.І. Панасенко, В.В. Парченко, О.А. Бігдан, А.А. Сафонов, Р.О. Щербина, А.С. Гоцуля, Є.О. Карпун, С.О. Федотов, А.В. Хільковець. Запоріжжя: ЗДМУ, 2022. 360 с.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Колесник Юрій Михайлович
д. мед. н., 14.01.02

Перелік осіб-виконавців

Гоцуля Андрій Сергійович
(д.фарм.н.)

Карпенко Юрій Вікторович
(к.х.н.)

Сафонов Андрій Андрійович
(к.фарм.н.)

Щербина Роман Олександрович
(д. фармац. н., 15.00.02)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Гоцуля Андрій Сергійович

Телефон

+38 (061) 224-64-70

Реєстратор

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

