

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U002245

Державний реєстраційний номер: 0125U001794

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-02-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дизайн сфокусованих суббібліотек для синтетичних досліджень в рамках “structure-based design” стратегії, побудова фармакофornoї моделі. Дизайн і синтез нових гетероциклічних похідних на основі тiazолу, тiazолідинону, тіопіранотіазолу для скринінгу.

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): Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322582111

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.): 989.910
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пошук нових потенційних антиконвульсантних агентів для терапії посттравматичної епілепсії серед військовослужбовців та цивільного населення

Назва роботи англійською:

Search for novel potential anticonvulsant agents for the treatment of post-traumatic epilepsy in military personnel and the civilian population

Реферат українською:

Науково-дослідна робота спрямована на пошук і наукове обґрунтування нових потенційних антиконвульсантних агентів для терапії посттравматичної епілепсії, зокрема серед військовослужбовців та цивільного населення. Актуальність дослідження зумовлена зростанням частоти посттравматичних уражень центральної нервової системи, високою часткою фармакорезистентних форм епілепсії, обмеженою ефективністю та побічними ефектами чинних протиепілептичних препаратів, а також потребою у створенні нових лікарських кандидатів із покращеним профілем ефективності та безпеки. У межах роботи реалізується комплексний міждисциплінарний підхід, що поєднує структурно-фрагментний аналіз активних фармацевтичних інгредієнтів протиепілептичних лікарських засобів групи АТС N03A, «fragment-based та structure-based» дизайн, *in silico* дослідження (фармакофорне моделювання, молекулярний докінг, аналіз ADME/PK параметрів і токсикологічне прогнозування), а також експериментальний органічний синтез гетероциклічних малих молекул. Така стратегія дозволяє здійснювати раціональний відбір перспективних структур ще на етапі молекулярного дизайну та мінімізувати ризики на подальших стадіях досліджень. Як пріоритетні хемотипи для пошуку нових антиконвульсантних агентів обрано похідні тіазолу, тіазолідинону та тіопірано[2,3-*d*]тіазолу, що характеризуються високою фармакофорною насиченістю, структурною варіативністю та доведеним біологічним потенціалом. У межах дослідження здійснюється дизайн сфокусованих суббібліотек, побудова фармакофорних моделей, апробація сучасних методів спрямованого органічного синтезу, зокрема каскадних і доміно-реакцій типу Кновенагеля-гетеро-Дільса-Альдера, а також відбір перспективних сполук для подальшого біологічного скринінгу.

Реферат англійською:

The research project is focused on the identification and scientific justification of novel potential anticonvulsant agents for the treatment of post-traumatic epilepsy, particularly among military personnel and civilian populations. The relevance of this study is determined by the increasing incidence of traumatic injuries to the central nervous system, a high prevalence of pharmacoresistant forms of epilepsy, the limited efficacy and adverse effects of existing antiepileptic drugs, and the urgent need for new drug candidates with improved efficacy and safety profiles. The project is based on a comprehensive interdisciplinary approach combining structural-fragment analysis of active pharmaceutical ingredients of antiepileptic drugs classified within the ATC N03A group, fragment-based and structure-based drug design strategies, and advanced *in silico* studies, including pharmacophore modeling, molecular docking, ADME/PK evaluation, and toxicity prediction. These computational approaches are integrated with experimental organic synthesis of heterocyclic small molecules, enabling rational selection of promising structures at the early design stage and reducing risks associated with subsequent experimental phases. Derivatives of thiazole, thiazolidinone, and thiopyrano[2,3-*d*]thiazole have been selected as priority chemotypes due to their high pharmacophoric density, structural flexibility, and demonstrated biological potential. Within the project framework, focused sub-libraries are designed, pharmacophore models are developed, and modern targeted synthetic methodologies are applied, including cascade and domino reactions such as the Knoevenagel-hetero-Diels-Alder process. The resulting compounds are subjected to rational selection for further biological screening.

Індекс УДК:547.7/.8, 615.017:616.079;615.2/.3.001.37, 616.8:616.001, 616.8-009.12-053.3, 616.853, 547:544-42/.43

Коди тематичних рубрик: 31.21.27, 34.45.05, 76.29.42.17, 76.29.47.19, 76.29.52.37, 31.21.18

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Половкович Святослав Володимирович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Фармакофорні моделі потенційних антиконвульсантних агентів на основі похідних тiazолу, тiazолідинону та тіопірано[2,3-d]тіазолу з урахуванням ЦНС-орієнтованих ADME-критеріїв.

Назва НТП англійською: Pharmacophore models of potential anticonvulsant agents based on thiazole, thiazolidinone, and thiopyrano[2,3-d]thiazole derivatives will be developed and validated with consideration of CNS-oriented ADME criteria.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали, Методи, теорії, гіпотези, Методичні документи

Галузь застосування: 72.19 Дослідження та експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Продукцією науково-дослідної роботи є науково обґрунтований комплекс методів і результатів, призначених для розробки нових потенційних антиконвульсантних лікарських засобів для терапії посттравматичної епілепсії, зокрема у військовослужбовців і цивільного населення, що включає систему раціонального молекулярного дизайну, in silico відбору та синтезу гетероциклічних малих молекул; у межах НДР систематизовано хімічний простір протиепілептичних активних фармацевтичних інгредієнтів групи АТС N03A, ідентифіковано ключові фармакофорні елементи, розроблено фармакофорні моделі з урахуванням фармакокінетичних характеристик, оптимізованих для дії в центральній нервовій системі, запропоновано пріоритетні хемотипи на основі похідних тiazолу, тiazолідинону та тіопірано[2,3-d]тіазолу, синтезовано серії перспективних сполук із використанням сучасних каскадних і доміно-реакцій, частину з яких ідентифіковано як хіт-кандидати з протисудомною активністю та прийнятним профілем безпеки, придатні для подальших доклінічних фармакологічних досліджень і застосування у фармацевтичних, біомедичних та освітньо-наукових розробках.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не 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):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Демидов Іван Васильович

Д. Т. Н.

Перелік осіб-виконавців

Гойдик Михайло Володимирович
(226)

Кархут Андрій Ігорович
(к. х. н., доц.)

Конечна Роксолана Тарасівна
(к. фармац. н., доц.)

Лозинський Андрій Володимирович
(д. фармац. н., професор)

Роман Олександра МIRONІВНА
(к. фармац. н., доц.)

Стасевич Марина Володимирівна
(д. х. н., професор)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Рибалкіна Ірина Борисівна

Телефон

(032)258 27 46

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна