

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000126

Державний реєстраційний номер: 0120U104782

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Підготовчий етап. Експериментальний етап (синтез конденсованих азагетероциклів, дослідження їх цитотоксичної дії антибактеріальної активності відносно полірезистентних штамів; синтез похідних ізотіокумаринів та їх структурних аналогів, дослідження їх цитотоксичної/протизапальної/антимікробної активності). Підбиття підсумків досліджень етапу проекту

Початок етапу: 09.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код за ЄДРПОУ: 02010793

Місцезнаходження: вул. Пекарська, буд. 69, м. Львів, Львівська обл., 79010, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322603066, 380322757632

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622, 380442981622

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): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1422.900

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Тіазолідинони з поліфармакологічними властивостями: молекулярний дизайн, синтез та механізми дії протиракових, протизапальних та протимікробних засобів

Назва роботи англійською:

Thiazolidinones with polypharmacological properties: molecular design, synthesis and mechanisms of action of anticancer, anti-inflammatory and antimicrobial agents

Реферат українською:

У процесі роботи проведено синтез «лікоподібних молекул» на основі конденсованих похідних тіазолотіопіранів, які було одержано шляхом реакції гетеро-Дільса-Альдера з дієнофілами, що є ефективними реагентами в перциклічних реакціях, особливо в при побудові різних поліциклічних систем. На основі гібрид-фармакофорного підходу було обрано оптимальні напрямки одержання тіазолопіридинів, а саме бібліотеки 5-метил(ариліден)-7-феніл-3Н-тіазоло[4,5-*b*]піридин-2-онів і подальше вивчення їхнього фармакологічного профілю і токсиметричних параметрів. З метою формування комбінаторних бібліотек гетероциклічних було проведено також синтез нових конденсованих похідних з ізотіокумариновим каркасом, шляхом лужного гідролізу 5-ариліден роданінів через двохетапну реакцію, при якій проміжні продукти гідролізу (тіопіровиноградні кислоти) зазнають гетероциклізації з утворенням 1-оксо-1Н-2-бензотіопіран-3-карбонових кислот, які стали прекурсорами для одержання відповідних хлорангідридів 1-оксо-1Н-2-бензотіопіран-3-карбонових кислот. На основі вищезгаданих хлорангідридів вперше було одержано групу неописаних в літературі функціональних похідних ізотіокумарин-3-карбонових кислот за карбоксильною групою. На основі комплексної ЯМР спектроскопії, елементного аналізу та інших спектральних досліджень підтверджено структуру синтезованих сполук. Скринінгові дослідження фармакологічної активності синтезованих конденсованих молекул дозволив виділити ряд перспективних агентів з протираковою та протимікробною активностями, та основі чого було встановлено закономірності кореляції «структура – дія».

Реферат англійською:

The synthesis of "drug-like molecules" based on condensed thiazolothiohyran derivatives, which was obtained by the reaction of hetero-Diels-Alder with dienophiles, which are effective reagents in pericyclic reactions, especially in the construction of various polycyclic systems. Based on the hybrid pharmacophore approach, the optimal directions for the production of thiazolopyridines were selected, namely the library of 5-methyl (arylidene) -7-phenyl-3H-thiazolo [4,5-*b*] pyridin-2-ones and further study of their pharmacological profile and toximetric parameters. In order to form heterocyclic combinatorial libraries, new condensed derivatives with a isothiocoumarin framework were synthesized by alkaline hydrolysis of 5-arylidene rhodanines through a two-step reaction in which intermediate hydrolysis products (thiopyruvic acids) formate heterocyclo-1 3-carboxylic acids, which became precursors for the production of the corresponding 1-oxo-1H-2-benzothiohyran-3-carboxylic acid chlorides. On the basis of the above-mentioned acid chlorides, for the first time, a group of functional derivatives of isothiocoumarin-3-carboxylic acids not described in the literature by the carboxyl group was obtained. The structure of the synthesized compounds was confirmed by complex NMR spectroscopy, elemental analysis and other spectral studies. Screening studies of the pharmacological activity of the synthesized condensed molecules allowed to identify a number of promising agents with anticancer and antimicrobial activities, on the basis of which the regularities of the «structure-action» correlation were established.

Індекс УДК: 615.1, 615.012.1:547.79

Коди тематичних рубрик: 76.31.30

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лесик Роман Богданович

Науковий ступінь: д. фармац. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові гетероциклічні сполуки на основі 4-тіазолідинонів та тіазолів як протимікробні та протипухлинні агенти

Назва НТП англійською: New heterocyclic compounds based on 4-thiazolidinone and thiazole cores as antimicrobial and anticancer agents

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Створення потенційних біологічно активних сполук

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих наук, медицина, фармація

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Нові гетероциклічні сполуки на основі конденсованих 4-тіазолідинонів, а саме тіопіранотіазоли, тіазолопіридини та ізотіокумарини

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення нових класів сполук як потенційних лікарських засобів

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 09.2021

Закінчення етапу: 12.2021

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

1. Kryshchyshyn-Dylevych, A., Radko, L., Finiuk, N., Garazd, M., Kashchak, N., Posyniak, A., Niemczuk, K., Stoika, R., Lesyk, R. (2021). Synthesis of novel indole-thiazolidinone hybrid structures as promising scaffold with anticancer potential. *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, 50, 116453.

2. Lozynskyi, A., Konechnyi, Y., Senkiv, J., Yushyn, I., Khyluk, D., Karpenko, O., Shepeta, Y., Lesyk, R. (2021). Synthesis and Biological Activity Evaluation of Novel 5-Methyl-7-Phenyl-3H-Thiazolo[4,5-b]Pyridin-2-Ones.

Scientia Pharmaceutica, 89(4), 52.

3. Holota, S., Lozynskyi, A., Konechnyi, Y., Shepeta, Y., Lesyk, R. (2021). 5-[4-(tert-Butyl) cyclohexylidene]-2-thioxothiazolidin-4-one. Molbank, 2021(4), M1281.

4. Rumynska, T. M., Hural, A. R., Konechnyi, Y. T., Vynnytska, R. B., Lozynskyi, A. V., Salyha, Y. T., Korniychuk, O. P., Lesyk, R. B. (2021). Microbial biofilms and some aspects of anti-inflammatory drug use. Biopolymers & Cell, 37(4), 247.

Х. Заключение відомості

Керівник юридичної особи

Зіменковский Борис Семенович
д. фармац. н., 15.00.02

Перелік осіб-виконавців

Конечний Юліан Тарасович

Крищишин-Дилевич Анна Петрівна
(к.фарм.н., 15.00.02)

Лозинський Андрій Володимирович
(к. фармац. н.)

Сеньків Юлія Василівна

Фінюк Наталія Степанівна
(к. б. н.)

Юшин Ігор Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Лозинський А.В.

Телефон

+38 (063) 351-76-37

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

