

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U000053

Державний реєстраційний номер: 0125U0000989

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-01-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Нові 7-аміно-, 7-амідо- та 7-сульфоніламідовмісні оксазолопіримідини та їх протиракова активність.

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): 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.): 4000.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дизайн, синтез і біологічна активність нових азолоазинів як потенційних протипухлинних агентів.

Назва роботи англійською:

Design, synthesis, and biological activity of new azoloazines as potential anticancer agents.

Реферат українською:

Створено низку нових прогностичних класифікаційних та регресійних QSAR-моделей із використанням платформи OCHEM для дизайну структури та синтезу 7-аміно- та 7-сульфоніламідовмісних оксазоліпіримідинів. Синтезовано нові заміщені оксазоло[4,5-d]піримідини та їх аналоги - біциклічні конденсовані похідні тієнопіримідинів, піролопіримідинів, оксadiaзоліпіридинів та оксазоліпіридинів як потенційних протиракові агенти, активність яких оцінювали проти клітинних ліній NCI-60. За даними ADMET-аналізу показано, що усі синтезовані сполуки відповідають критеріям лікарської активності. За допомогою молекулярного докінгу підтверджено їх взаємодію з карбоангідразою XII як можливий механізм дії, що робить ці молекули перспективними кандидатами проти раку ЦНС та легень. Синтезовано нові функціоналізовані 2,5-діарил-оксазоло[4,5-d]піримідин-7-іл-аміни і досліджено їх активність проти клітинних ліній HeLa, A549, HepG2, T98G та неракової лінії NCTC clone 929. Виявлено три сполуки, які проявили високу цитотоксичність проти клітин HeLa та встановлено, що дві з них були селективними щодо неракових клітин.

Реферат англійською:

A series of new predictive classification and regression QSAR models were created using the OCHEM platform for the design and synthesis of 7-amino- and 7-sulfonylamide-containing oxazolopyrimidines. New substituted oxazolo[4,5-d]pyrimidines and their analogues - bicyclic condensed derivatives of thienopyrimidines, pyrrolopyrimidines, oxadiazolopyridines and oxazolopyridines - were synthesized as potential anticancer agents, the activity of which was evaluated against NCI-60 cell lines. ADMET analysis showed that all synthesized compounds meet the criteria for drug activity. Molecular docking confirmed their interaction with carbonic anhydrase XII as a possible mechanism of action, making these molecules promising candidates against CNS and lung cancer. New functionalized 2,5-diaryl-oxazolo[4,5-d]pyrimidin-7-yl-amines were synthesized and their activity against HeLa, A549, HepG2, T98G cell lines and the non-cancerous NCTC clone 929 cell line was investigated. Three compounds were found to exhibit high cytotoxicity against HeLa cells, and two of them were found to be selective for non-cancerous cells.

Індекс УДК: 547.64, 547.73, 547.8

Коди тематичних рубрик: 31.21.25.09, 31.21.27.05, 31.21.27.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Пільо Степан Григорович

Науковий ступінь: д.х.н.

Вчене звання: с.д.

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7089-1393

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові QSAR моделі для прогнозування протиракової активності похідних оксазоло[4,5-d]піримідину та ізомерних оксазоло[5,4-d]піримідинів. Методи синтезу нових 7-аміно-, 7-амідо- та 7-сульфоніламідовмісних оксазоло[4,5-d]піримідинів та їх аналогів – біциклічних конденсованих похідних піримідину та піридину.

Назва НТП англійською: New QSAR models for predicting the anticancer activity of oxazolo[4,5-d]pyrimidine derivatives and isomeric oxazolo[5,4-d]pyrimidines. Methods for the synthesis of new 7-amino-, 7-amido- and 7-sulfonylamide-containing oxazolo[4,5-d]pyrimidines and their analogues – bicyclic condensed pyrimidine and pyridine derivatives.

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: Установи Національної академії наук України; установи Міністерства освіти і науки; установи Міністерства охорони здоров'я.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблено ряд нових прогностичних класифікаційних та регресійних QSAR моделей з використанням платформи OCHEM для дизайну структури та синтезу нових 7-аміно- та 7-сульфоніламідовмісних оксазолопіримідинів та їх аналогів – біциклічних конденсованих похідних: тієнопіримідинів, піролопіримідинів, оксадіазолопіридинів та оксазолопіридинів як потенційних протиракових агентів. Для отримання нових похідних оксазолопіримідинів та їх біциклічних конденсованих аналогів розроблено методи органічного синтезу та фізико-хімічні методи аналізу структур, включаючи спектроскопічні методи, мас-спектрометрію та елементний аналіз. Проведено SAR та ADME/T аналіз синтезованих сполук та встановлено закономірності між будовою та активністю. Вивчено закономірності структура-активність цих азагетероциклів та проведено *in silico* ідентифікацію ймовірних білкових мішеней, що підтверджує раціональність подальшої оптимізації їхніх структур.

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

Вплив НТП на довкілля: Не справляє шкідливого впливу.

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2025

Закінчення етапу: 12.2025

Споживачі продукції: Установи Національної академії наук України, Установи Міністерства освіти і науки., Установи Міністерства охорони здоров'я.

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:

IX. Бібліографічний опис

1. Pilyo S.G., Kachaeva M.V., Zhirnov V.V., Kovalishyn V.V., Semenyuta I.V., Velihina Ye.S., Metelytsia L.O., Brovarets V.S. Design, Synthesis, Anticancer Screening and Virtual Analysis of New 7-Sulfonyldiazepan- and 7-Sulfonylpiperazine-substituted Oxazolo[4,5-d]pyrimidines. SynOpen. 2025. DOI: 10.1055/a-2688-5534.
2. M.V. Kachaeva, S.G. Pilyo, A.B. Olejniczak, M. Denel-Bobrowska, V.V. Zhirnov, Y.S. Velihina, V.S. Brovarets. Design, synthesis and biological evaluation of 2,5-diaryl-oxazolo[4,5-d]pyrimidin-7-yl-amines as selective cytotoxic agents against HeLa cells. Beilstein Journal of Organic Chemistry. 2025.
3. Pilyo S.G., Kachaeva M.V., Popilnichenko S.V., Mitiukhin O.P., Golovchenko O.V., Brovarets V.S. New 7-sulfonylamide-substituted oxazolo[4,5-d]pyrimidines: design, synthesis and anticancer testing in SNB-75 CNS cells. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / за загальною ред. А.І. Вовка. Київ: Інтерсервіс, 2025. С. 224–231.
4. A. Varenyk, R. Vydzhak, S. Panchishin, I. Ivanova, V. Zhirnov, V. Brovarets. Design, synthesis, SAR and ADMET analyses of the novel class of synthetic 7-amino[1,2,5]oxadiazolo[3,4-b]pyridine-6-carboxylate derivatives with vasorelaxant activity. Results in Chemistry. 2025. Vol. 13. P. 102031.
5. Shevchenko N.M., Severin O.O., Kachaeva M.V., Kozachenko O.P., Pilyo S.G., Brovarets V.S. Pyrrolo[2,3-d]pyrimidine and thieno[2,3-d]pyrimidine derivatives based on piperazinyl oxazoles: design and admet profiling. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / за загальною ред. А.І. Вовка. Київ: Інтерсервіс, 2025. С. 198–202.
6. Вареник А.О., Виджак Р.М., Панчишин С.Я., Іванова І.В., Жирнов В.В., Броварець В.С. Дизайн і синтез нових похідних 7-аміно[1,2,5]оксадіазоло[3,4-б]піридин-6-карбоксилатів з вазорелаксантною активністю. Біоактивні сполуки, нові речовини і матеріали / за загальною ред. А.І. Вовка. Київ: Інтерсервіс, 2025. С. 216–219.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попільніченко Сергій Валентинович

к.х.н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Броварець Володимир Сергійович

(д. х. н., професор, чл-кор.НАН України, 02.00.10)

Головченко Олександр Володимирович

(к.х.н., с.д., 02.00.10)

Жирнов Віктор Валентинович

(д. мед. н., пров.н.с., 14.03.06)

Качаєва Марина Володимирівна

(к.х.н., 02.00.10)

Ковалішин Василь Володимирович

(к.х.н., 02.00.10)

Метелиця Лариса Олексіївна

(д. б. н., професор, 02.00.10)

Мітюхін Олег Петрович

(к.х.н., 02.00.06)

Попільніченко Сергій Валентинович

(к.х.н., 02.00.10)

Семенюта Іван Володимирович

(к.б.н., с.д., 02.00.10)

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