

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U003390

Державний реєстраційний номер: 0124U003939

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-06-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Похідні 1,2,4-триазолу як перспективні ліганди в процесі створення нових вітчизняних лікарських засобів

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 06.2025

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Щербина Роман Олександрович

Код за ЄДРПОУ: 3133621014

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

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380979181933

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Управління справами
Апарату Верховної Ради України

Код за ЄДРПОУ: 20064120

Місцезнаходження: вул. Грушевського, буд. 5, м. Київ, 01008, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Верховна Рада України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442552856

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: 2.7 - інше

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 0111010

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 181.680
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Похідні 1,2,4-триазолу як перспективні ліганди в процесі створення нових вітчизняних лікарських засобів

Назва роботи англійською:

The derivatives of 1,2,4-triazole as promising ligands in the process of creating new domestic drugs

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: Оригінальна молекула похідного 1,2,4-триазолу з гепатопротекторною та антиоксидантною активністю, а також нові синтезовані похідні 1,2,4-триазолу. Мета дослідження: Доукомплектування доклінічного дос'є оригінальної молекули шляхом розробки таблетованої форми для клінічних випробувань та пошук нових кандидатів у ліки серед похідних 1,2,4-триазолу через синтез, *in vitro* та *in silico* дослідження. Методи дослідження: Використовувалися сучасні методи органічного синтезу, спектральні методи (ЯМР, ІЧ-спектроскопія, мас-спектрометрія), елементний аналіз, високоефективна рідинна та тонкошарова хроматографія. Біологічну активність оцінювали *in vitro* тестами (цитотоксичність, антиоксидантна активність, протизапальні властивості). Застосовувалися *in silico* методи: молекулярний докінг, QSAR-аналіз, прогнозування ADMET-властивостей. Доклінічні дані систематизовано та проаналізовано. Результати: Узагальнено доклінічні дані оригінальної молекули, підтверджено її терапевтичний потенціал і безпеку. Розроблено пропозиції щодо стабільної таблетованої форми, завершено доклінічне дос'є. Синтезовано нові похідні 1,2,4-триазолу, проведено їх *in vitro* та *in silico* дослідження, виявлено перспективні кандидати у ліки з потужною активністю. Практичне значення: Результати сприяють створенню нового українського лікарського засобу, готового до клінічних випробувань. Встановлені методи синтезу та закономірності "структура-активність" створюють базу для розробки оригінальних препаратів, зміцнюючи фармацевтичну незалежність України. Ключові слова: похідні 1,2,4-триазолу, гепатопротекторна активність, антиоксидантна дія, доклінічні дослідження, таблетована форма, *in silico* дослідження, *in vitro* дослідження, кандидат у ліки, фармацевтична розробка.

Реферат англійською:

Object of study: An original 1,2,4-triazole derivative molecule with hepatoprotective and antioxidant activity, as well as newly synthesized 1,2,4-triazole derivatives. Aim of study: To complete the preclinical dossier of the original molecule by developing a tablet form for clinical trials and to search for new drug candidates among 1,2,4-triazole derivatives through synthesis, *in vitro*, and *in silico* studies. Methods: Modern organic synthesis methods were used. Structural analysis involved spectral methods (NMR, IR spectroscopy, mass spectrometry), elemental analysis, high-performance liquid chromatography, and thin-layer chromatography. Biological activity was assessed via validated *in vitro* tests (cytotoxicity, antioxidant activity, anti-inflammatory properties). *In silico* methods included molecular docking, QSAR analysis, and ADMET prediction. Preclinical data were systematized and analyzed. Results: Preclinical data on the original molecule were summarized, confirming its therapeutic potential and safety. Proposals for a stable, bioavailable tablet form were developed, completing the preclinical dossier. New 1,2,4-triazole derivatives were synthesized, and their *in vitro* and *in silico* studies identified promising drug candidates with potent activity. Practical significance: The results pave the way for a new Ukrainian drug ready for clinical trials. Established synthesis methods and structure-activity relationships provide a foundation for developing original drugs, enhancing Ukraine's pharmaceutical independence. Keywords: 1,2,4-triazole derivatives, hepatoprotective activity, antioxidant effect, preclinical studies, tablet form, *in silico* studies, *in vitro* studies, drug candidate, pharmaceutical development.

Індекс УДК: 615.1

Коди тематичних рубрик: 76.31.29.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Щербина Роман Олександрович

Науковий ступінь: д. фармац. н.

Вчене звання: доц.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Похідні 1,2,4-триазолу як перспективні ліганди в процесі створення нових вітчизняних лікарських засобів

Назва НТП англійською: The derivatives of 1,2,4-triazole as promising ligands in the process of creating new domestic drugs

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології, Матеріали, нові речовини і матеріали

Галузь застосування: органічний та фармацевтичний синтез, фармакологія та біологія, медицина та фармація

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Доукомплектування доклінічного досьє на оригінальну молекулу похідного 1,2,4-триазолу з гепатопротекторною та антиоксидантною активністю шляхом розробки пропозицій щодо її таблетованої форми з метою підготовки до клінічних випробувань, а також продовження пошуку нових перспективних кандидатів у ліки серед похідних 1,2,4-триазолу через синтез, *in vitro* та *in silico* дослідження.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2024

Закінчення етапу: 06.2025

Споживачі продукції: фармацевтичні компанії

Перспективні ринки: Україна, Європа

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

Карпенко Ю.В., Панасенко О.І., Парченко В.В., Сафонов А.А., Щербина Р.О., Гоцуля А.С., Федотов С.О. Молекулярний дизайн та хімічні перетворення 5-гетерил-4R-1,2,4-триазол-3(2H)-тіонів: монографія. Запоріжжя: ЗДМФУ, 2024. 316 с. ISBN 978-966-417-043-7.

Skoryi M.P., Shcherbyna R.O. Synthesis of 1,2,4-triazole-based compounds with 2-bromo-5-methoxyphenyl substituents as potential pharmacological agents // Актуальні питання сучасної медицини та фармації – 2025: тези Всеукр. наук.-практ. конф. молодих вчених та студентів з міжнар. участю (15–16 травня 2025 р.). Запоріжжя: ЗДМФУ, 2025. С. 248–249.

Кальченко В.В., Щербина Р.О. Синтез, будова та властивості N-R-амідів 2-((5-(2-бром-4-флуорфеніл)-4-феніл-4H-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)оцтової кислоти // Актуальні питання сучасної медицини та фармації – 2025: тези Всеукр. наук.-практ. конф. молодих вчених та студентів з міжнар. участю (15–16 травня 2025 р.). Запоріжжя: ЗДМФУ, 2025. С. 272.

Skoryi M.P., Al Halaf N.A., Shcherbyna R.O. In silico study of anti-inflammatory activity among new 2-((5-(2-bromo-5-methoxyphenyl)-4-R-1,2,4-triazol-3-yl)thio)acetic acids and their esters // Актуальні питання сучасної медицини та фармації – 2024: тези Всеукр. наук.-практ. конф. молодих вчених та студентів з міжнар. участю (23–24 травня 2024 р.). Запоріжжя: ЗДМФУ, 2024. С. 162.

Skoryi M.P., Shcherbyna R.O. QSAR prediction of toxicity for a new 1,2,4-triazole derivatives with 2-bromo-5-methoxyphenyl fragment // Актуальні питання фармацевтичної і медичної науки та практики. 2024. Т. 17, № 3. С. 226–230.

Кальченко В.В., Щербина Р.О. Комп'ютерне прогнозування токсичності нових S-алкіл похідних 1,2,4-триазолу // Актуальні питання фармацевтичної і медичної науки та практики. 2024. Т. 17, № 3. С. 226–230.

Скорий М., Щербина Р.О. Застосування методу комп'ютерного прогнозування токсичності нових похідних 1,2,4-триазолу в процесі пошуку потенційних лікарських засобів // Науково-технічний прогрес і оптимізація технологічних процесів створення лікарських препаратів: тези X наук.-практ. конф. з міжнар. участю (17–18 жовтня 2024 р.). Тернопіль: ТНМУ, 2024. С. 22–23.

Kalchenko V.V., Shcherbyna R.O., Panasenko O.I., Salionov V.O., Morozova L.P. Evaluation of the antioxidant potential of some 5-(2-bromo-4-fluorophenyl)-4-ethyl-1,2,4-triazole-3-thiol derivatives // Одеський медичний журнал. 2024. № 5 (190). С. 89–94.

Safonov A.A., Gotsulya A.S., Shcherbyna R.O., Panasenko O.I. Analysis of the effect of sodium 2-((4-amino-5-(thiophen-2-ylmethyl)-4H-1,2,4-triazol-3-yl)thio)acetate high doses on brain tissue // Одеський медичний журнал. 2025. № 1 (192). С. 80–83.

Щербина Р.О., Хромильова О.В., Німенко Г.Р., Саліонов В.О. Розробка оптимального складу таблеток із діючою речовиною калій 2-((4-аміно-5-(морфолінометил)-4H-1,2,4-триазол-3-іл)тіо)ацетатом. Повідомлення 1. Вивчення впливу допоміжних речовин на насипну густину, насипну густину після усадки, текучість і кут природного укосу порошкових мас // Актуальні питання фармацевтичної і медичної науки та практики. – 2024. – Том 17, № 2. – С. 144–149.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Колесник Юрій Михайлович

д. мед. н.

Перелік осіб-виконавців

Щербина Роман Олександрович

(д. фармац. н., 15.00.02)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Щербина Роман Олександрович / Shcherbyna Roman O.

Телефон

+38 (097) 918-19-33

Реєстратор

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

