

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U001012

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-02-2024

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Семенець Антон Павлович

2. Anton P. Semenets

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 226

Назва наукової спеціальності: Фармація, промислова фармація

Галузь / галузі знань: охорона здоров'я

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Фармація

Дата захисту: 19-02-2024

Спеціальність за освітою: фармація

Місце роботи здобувача: Товариство з обмеженою відповідальністю "Юрія-Фарм"

Код за ЄДРПОУ: 30109129

Місцезнаходження: вул. М. Амосова, вул. 10, Київ, 03680, Україна

Форма власності: Приватна/недержавна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 64.605.077

Повне найменування юридичної особи: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: вул. Пушкінська, буд. 53, Харків, Харківський р-н., 61002, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: вул. Пушкінська, буд. 53, Харків, Харківський р-н., 61002, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 76.31.29.15, 76.31.33.05

Тема дисертації:

1. Молекулярне моделювання та синтез біологічно активних речовин ноотропної дії в ряду похідних 4-R-1-бензилпіролідін-2-ону
2. Molecular modeling and synthesis of biologically active substances with nootropic action in a series of 4-R-1-benzylpyrrolidin-2-one derivatives

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена пошуку нових біологічно активних речовин в ряду похідних 4-R-1-бензилпіролідін-2-ону, дослідженню їх ноотропних властивостей за допомогою методів *in silico* та *in vivo*. Вперше у рамках дисертаційного дослідження визначені оптимальні напрямки структурної модифікації та розроблені препаративні методи синтезу цільових похідних. За допомогою методології молекулярного докінгу та експериментального скринінгу підтверджено перспективність пошуку ноотропних речовин в досліджуваному ряду речовин. Підтвердженням ефективності такого пошуку стало виявлення найбільш перспективної сполуки 1-бензил-4-{4-[2-оксо-2-(піперидин-1-іл)етил]-5-сульфаніліден-4,5-дигідро-1H-1,2,4-тріазол-3-іл}піролідін-2-ону, що має виразну ноотропну (антиамнестичну) активність, яка перевищує показники референс препарату Пірацетаму більше ніж у 2 рази і має сприятливі розраховані *in silico* ADMET-властивості. Сполука може бути одержана в умовах хіміко-фармацевтичного підприємства за доступною

технологією, що дозволяє передбачити можливість її застосування у медичній практиці для лікування когнітивних дисфункцій.

2. The dissertation work is devoted to the search for new biologically active substances in a number of 4-R-1-benzylpyrrolidin-2-one derivatives, to the study of their nootropic properties using in silico and in vivo methods. For the first time, within the framework of the dissertation research, optimal directions of structural modification were determined and preparative methods for the synthesis of target derivatives were developed. Using the methodology of molecular docking and experimental screening, the prospect of finding nootropic substances in the investigated series of substances was confirmed. The discovery of the most promising compound 1-benzyl-4-{4-[2-oxo-2-(piperidin-1-yl)ethyl]-5-sulfanilidene-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-3-yl}pyrrolidin-2-one, which has a distinct nootropic (anti-amnestic) activity that exceeds the indicators of the reference drug Piracetam by more than 2 times and has favorable ADMET properties calculated in silico. The compound can be obtained in the conditions of a chemical-pharmaceutical enterprise using available technology, which allows predicting the possibility of its use in medical practice for the treatment of cognitive dysfunctions.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Науки про життя, нові технології профілактики та лікування найпоширеніших захворювань

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Впровадження нових технологій та обладнання для якісного медичного обслуговування, лікування, фармацевтики

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Semenets A., Suleiman M., Georgiyants V., Kovalenko S., Kobzar N., Grinevich L., Pokrovskii M., Korokin M., Soldatov V., Bunyatyan V., Perekhoda L. Theoretical justification of a purposeful search of potential neurotropic drugs. ScienceRise: Pharmaceutical Science. 2020. №4 (26). С. 4- 17. doi.org/10.15587/2519-4852.2020.210042. (Scopus, quartile 4).
- 2. Semenets A. P., Suleiman M. M., Fedosov A. I., Shtrygol S. Yu., Havrylov Ih. O., Mishchenko M. V., Kovalenko S. M., Georgiyants V. A., Perekhoda L. O. Synthesis, docking, and biological evaluation of novel 1-benzyl-4-(4-(R)-5- sulfonylidene-4,5-dihydro-1H-1,2,4-triazol-3-yl)pyrrolidin-2-ones as potential nootropic agents. European Journal of Medicinal Chemistry. 2022. 244. P. 114823. doi.org/10.1016/j.ejmech.2022.114823 (Scopus, quartile 1)

Наукова (науково-технічна) продукція: технології; матеріали

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

Охоронні документи на ОПВ:

Винаходи, корисні моделі, промислові зразки

Перехода Л. О., Семенець А. П., Сулейман М. М., Георгіянц В. А., Коваленко С. М., Штриголь С. Ю., Федосов А. І., Яременко В. Д. 1- Бензил-4-{4-[2-оксо-2-(піперидин-1-іл)етил]-5-сульфаніліден-4,5-дигідро-1H-1,2,4-тріазол-3-іл}піролідин-2-он, що виявляє ноотропну активність: пат. на корисну модель № 153961 України: МПК С07D 207/26, С07D 249/08, С07D 281/10, С07D 291/04, С07D 295/00, А61P 25/28. № у 2022 04591; заявл. 05.12.2022; опубл. 28.09.2023, Бюл. № 39

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0114U000943 – органічний синтез та аналіз БАР, розробка лікарських засобів на основі синтетичних та напівсинтетичних субстанцій; 0114U000944 – молекулярний дизайн і

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Перехода Ліна Олексіївна
2. Lina O. Perekhoda

Кваліфікація: д.фарм.н., професор, 15.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: вул. Пушкінська, буд. 53, Харків, Харківський р-н., 61002, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коваленко Сергій Іванович
2. Serhiy I. Kovalenko

Кваліфікація: д.фарм.н., професор, 15.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

Код за ЄДРПОУ: 02066747

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 72, Дніпро, Дніпровський р-н., 49045, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лесик Роман Богданович
2. Roman B. Lesyk

Кваліфікація: д.фарм.н., професор, 15.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний медичний університет імені Данила Галицького

Код за ЄДРПОУ: 02010793

Місцезнаходження: вул. Пекарська, буд. 69, Львів, 79010, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Власов Сергій Віталійович

2. Sergiy V. Vlasov

Кваліфікація: д. фармац. н., професор, 15.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: вул. Пушкінська, буд. 53, Харків, Харківський р-н., 61002, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Голік Микола Юрійович

2. Mykola Y. Golik

Кваліфікація: д. фармац. н., професор, 15.00.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний фармацевтичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010936

Місцезнаходження: вул. Пушкінська, буд. 53, Харків, Харківський р-н., 61002, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство охорони здоров'я України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Журавель Ірина Олександрівна

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Журавель Ірина Олександрівна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Орленко Інна Вікторівна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна