

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U000607

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-02-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Копак Назарій Андрійович

2. Nazarij A. Kopak

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, промислова фармація

Дата захисту: 02-08-2024

Спеціальність за освітою: фармація, промислова фармація

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 6006

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 61.45, 76.31

Тема дисертації:

1. Цілеспрямований пошук перспективних антимікробних та антивірусних субстанцій серед S-естерів 4-ациламінобензентіосульфокислот
2. Targeted search for promising antimicrobial and antiviral substances among S-esters of 4-acylaminobenzenethiosulfonic acids.

Реферат:

1. Дисертаційна робота спрямована на систематичне дослідження біологічної активності S-естерів 4-ациламінобензентіосульфокислот з використанням *in silico* методів для виявлення та оцінки їхнього потенціалу як перспективних антимікробних та антивірусних агентів з метою подальшого розроблення стратегії синтезу та впровадження в промислове виробництво інноваційних засобів для лікування інфекційних захворювань. Опрацьовано та систематизовано літературні дані щодо поточного стану проблеми антибіотикорезистентності, перспектив пошуку потенційних антивірусних та антимікробних субстанцій серед S-естерів тіосульфокислот і можливостей застосування *in silico* методів для пришвидшення створення лікарських засобів та показано, що проблема резистентності мікробів та вірусів на сьогоднішній день стала надзвичайно актуальною і має глобальні масштаби. Надмірне та необережне використання антибіотиків призводить до швидкого розвитку резистентності, що ускладнює лікування інфекційних

захворювань та підвищує ризик смертності серед населення. Щоб ефективно протистояти цьому явищу, варто зосередитися на розробці нових медикаментів, які мають здатність ефективно боротися як з вірусними, так і з бактеріальними інфекціями. У цьому контексті, велику увагу привертають дослідження у галузі одержання і систематичного вивчення тіосульфоестерів та можливості використання сучасних *in silico* методів для прискорення процесу розробки нових препаратів. Ці напрямки досліджень відкривають широкі перспективи у вирішенні найбільш актуальних проблем сучасної медицини та мають з потенціал для створення ефективних засобів лікування, які забезпечать захист населення від небезпечних інфекцій. Окреслено концептуальний дизайн дослідження присвяченого цілеспрямованому пошуку перспективних антимікробних та антивірусних субстанцій серед S-естерів 4-ациламінобензентіосульфоокислот. Аргументовано вибір досліджуваних сполук та сформовано бібліотеку S- естерів 4- ациламінобензентіосульфоокислот для проведення віртуального скринінгу біологічної активності. Проведено маркетинговий аналіз протиінфекційних лікарських засобів для системного застосування, які зареєстровані в Україні в сегментах антибактеріальних (J01), прогрибкових (J02) та антивірусних (J05) препаратів, та визначено найбільші підгрупи препаратів за обсягом зареєстрованих найменувань. У групі антибактеріальних препаратів найпоширеніший представник - Левофлоксацин (J01MA12), налічує 109 найменувань, що становить 10,28 % від загальної кількості зареєстрованих антибактеріальних препаратів. Серед протигрибкових – це Флуконазол, 78 найменувань, що становить 61 % від загальної кількості. Серед антивірусних такою лікарською речовиною виявився Ацикловір (J05AB01) з 26-ма найменуваннями та 9,38 % від загальної кількості препаратів. Досліджено розподіл зареєстрованих антимікробних та протівірусних препаратів за країною виробником. Встановлено, що у групі антибактеріальних засобів (J01) українські препарати становлять 30,2 % від загальної кількості зареєстрованих найменувань та посідають друге місце після індійських препаратів (32,7 %). У групі протимікробних засобів (J02) українські препарати складають 27,3 % від загальній кількості зареєстрованих найменувань та посідають друге місце після індійських препаратів (31,1 %). У групі протівірусних засобів (J05) українські препарати складають 19,9 % у загальній кількості зареєстрованих найменувань та посідають знову ж таки друге місце після індійських препаратів (44,2 %). Отже виявлено домінування препаратів індійського походження в усіх трьох 4 проаналізованих групах лікарських засобів, що вказує на потребу розширення вітчизняного виробництва та виведення на ринок нових вітчизняних препаратів.

2. The dissertation is aimed at a systematic study of the biological activity of S-esters of 4-acylaminobenzenethiosulfonic acids using *in silico* methods to identify and evaluate their potential as promising antimicrobial and antiviral agents with the aim of further developing a synthesis strategy and introducing innovative drugs for the treatment of infectious diseases into industrial production. The literature data on the current state of the problem of antibiotic resistance, the prospects for the search for potential antiviral and antimicrobial substances among S- esters of thiosulfonic acids, and the possibilities of using *in silico* methods to accelerate drug development have been processed and systematized. It has been shown that the problem of microbial and viral resistance has become extremely urgent and threatens global health. Excessive and careless use of antibiotics leads to the rapid development of resistance, complicating the treatment of infectious diseases and increasing mortality risk among the population. To effectively combat this phenomenon, it is crucial to focus on the development of new drugs capable of effectively fighting both viral and bacterial infections. In this context, significant attention is drawn to research in the field of obtaining and systematically studying thiosulfoesters and the possibilities of using modern *in silico* methods to accelerate the drug development process. These research directions open up broad prospects for solving the most pressing problems of modern medicine and have the potential to create effective treatment options that will protect the population from dangerous infections. 9 A conceptual design for a study dedicated to the targeted search for promising antimicrobial and antiviral substances among S-esters of 4- acylaminobenzenethiosulfonic acids has been outlined. The selection of compounds has been justified, and a library of S-esters of 4- acylaminobenzenethiosulfonic acids has been created for virtual screening of biological activity. A market analysis of systemic anti-infective drugs registered in Ukraine has been conducted, focusing on the segments of antibacterial (group J01), antifungal (group J02), and antiviral

(group J05) medications. The largest subgroups of drugs by the number of registered names have been identified. In the antibacterial drugs group, the most common representative is Levofloxacin (J01MA12), with 109 names, accounting for 10.28 % of the total number of registered antibacterial drugs. Among antifungal drugs, the most common is Fluconazole, with 78 names, which constitutes 61 % of the total. Among antiviral drugs, Acyclovir (J05AB01) is the leading substance, with 26 names, representing 9.38 % of the total number of drugs. The distribution of registered antimicrobial and antiviral drugs by country of manufacture has been studied. It has been established that in the antibacterial drugs group (J01), Ukrainian drugs account for 30.2 % of the total number of registered names, ranking second after Indian drugs (32.7 %). In the antifungal drugs group (J02), Ukrainian drugs constitute 27.3 % of the total number of registered names, also ranking second after Indian drugs (31.1 %). In the antiviral drugs group (J05), Ukrainian drugs make up 19.9 % of the total number of registered names, again ranking second after Indian drugs (44.2 %). Therefore, the dominance of Indian drugs in all three analyzed groups indicates a need to expand domestic production and introduce new domestic drugs to the market. Domestic manufacturers that produce the most names of drugs according to the State Register of Medicines have been identified. In the antibacterial drugs group (J01), Kyivmedpreparat leads with a 23 % share of domestic drug names. In the antifungal drugs

Державний реєстраційний номер ДіР: № 0119U101966

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: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- Копак Н. А. Searching of biological activity of S-esters 4- acetylaminobenzenethiosulfoacid using methods of chemoinformatics. Chemistry, Technology and Application of Substances = Хімія, технологія речовин та їх застосування. 2023. Vol. 6, № 2. P. 76–86
- Копак Н. А., Vasyliuk S. V. Marketing research of the pharmaceutical market of Ukraine in the segment of antiviral drugs for systemic use. Одеський медичний журнал. 2024. № 1 (186). С. 88–94.
- Копак Н. А., Василюк С. В. Обґрунтування перспективності розроблення вітчизняних протигрибкових препаратів на підставі аналізу їх асортименту на фармацевтичному ринку України. Сучасна медицина, фармація та психологічне здоров'я. 2023. № 2 (11). С. 90–95.

Наукова (науково-технічна) продукція: технології

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

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: № 0119U101966

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Василюк Софія Володимирівна

2. Sofia V. Vasylyuk

Кваліфікація: д.е.н., професор, 08.00.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кухтенко Олександр Сергійович

2. Olexandr S. Kuhtenko

Кваліфікація: д. фармацев. н., професор, 15.00.01

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. Драпак Ірина Володимирівна

2. IRYNA DRAPAK

Кваліфікація: д. фармацев. 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. Стадницька Наталія Євгенівна

2. Natalia Y. Stadnytska

Кваліфікація: к.х.н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Журахівська Леся Романівна

2. Lesia R. Zhurakhivska

Кваліфікація: к. х. н., доц., 02.00.03

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

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

Половкович Святослав Володимирович

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

Половкович Святослав Володимирович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Кричковська Аеліта Миронівна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна