

Наукова школа «Природні та синтетичні біологічно активні гетероцикли»

На хімічному факультеті працюють три наукові школи. Найстарішою є школа «Природні та синтетичні біологічно активні гетероцикли», яку засновано у 1950-ті роки заслуженим діячем науки і техніки України, докт. хім. наук, проф. Михайлом Сергійовичем Малиновським – талановитим вченим та педагогом, більшість робіт якого була пов'язана з отриманням та вивченням реакційної здатності епоксидних сполук. Разом із співробітниками ним було отримано ряд фундаментальних результатів у галузі синтезу біологічно активних речовин, похідних епоксидів. У 1991–2011 рр. керівником школи була докт. хім. наук, проф. Лілія Іванівна Кас'ян. Сьогодні справу М.С. Малиновського та Л.І. Кас'ян продовжує ректор ДНУ, заслужений діяч науки і техніки України, відмінник освіти України, чл.-кор. НАНУ, докт. хім. наук, проф. Сергій Іванович Оковитий. За роки існування цієї школи науковими керівниками та співробітниками захищено 5 докторських дисертацій, близько 50 кандидатських дисертацій, отримано більше 100 авторських свідоцтв, патентів на винаходи та корисні моделі, опубліковано 10 монографій та близько 600 наукових статей. Багато учнів, що вийшли з цієї школи зараз працюють у США, Німеччині, Японії, Польщі, Великобританії, Австралії, Швейцарії тощо. Наукова школа підтримує постійні контакти із своїми закордонними колегами і приймає участь у проведенні спільних досліджень, стажувань, конференцій та семінарів.

За кілька останніх десятиліть було проведено ряд фундаментальних НДР з тематики діяльності школи, таких як: Функціоналізовані та конденсовані азоли – потенційні антибактеріальні агенти: дизайн, синтез, перспективи застосування для потреб медицини та техніки (2026-2028); Нові азагетероцикли - молекулярний дизайн, синтез, перспективи застосування для фармакокорекції посттравматичних стресових розладів і метаболічного синдрому (2025-2027); Синтез N,O,S-вмісних гетероциклів та дослідження їх взаємодії з нуклеїновими кислотами (2022-2024); Конструювання N,O,S-вмісних гетероциклів із залученням нових каталітичних систем. Експериментальне та теоретичне дослідження (2019-2021); Нова компонентна база для створення високоенергетичних систем. Синтез, моделювання енергоємних композицій та процесів їх трансформації (2018-2020); Нові біологічно активні та енергоємні гетерополіциклічні сполуки. Синтез, модифікація, теоретичне моделювання властивостей та процесів трансформації (2016-2018); Направлений синтез біологічно важливих гетероциклічних та відкритих гетероатомних структур на базі промислово доступних дієнів (2013-2015); Похідні каркасних амінів і кислот в синтезі нових аліциклічних і гетероциклічних сполук. Експериментальне та теоретичне дослідження (2010-2012); Аліциклічні та гетероциклічні оксигено-

та нітрогеновмісні сполуки. Синтез, структура, реакційна здатність (2007-2009); Нові гетерополіциклічні системи на основі каркасних епоксидних сполук – теоретичні основи та стратегія синтезу (2007-2009).

Основні напрями сучасної наукової роботи школи це:

- Дослідження методів синтезу та біологічної активності нових азагетероциклічних систем;
- Розробка нових фотохімічних методів формування C-C, C-S та C-N зв'язків;
- Розробка методів фторування органічних сполук для потреб медичної та агрохімії;
- Дослідження механізмів органічних реакцій методами квантової хімії та машинного навчання;
- Розробка методів синтезу та дослідження властивостей нових фотоперемикачів здатних накопичувати та зберігати теплову сонячну енергію в хімічних зв'язках.

За даними напрямами нещодавно отримані наступні результати:

- Розроблено ряд нових методів синтезу азагетероциклічних сполук із комерційно доступних реагентів, часто із залученням методів «зеленої» хімії;
- Створено велику комбінаторну бібліотеку нових азотовмісних гетероциклічних сполук та проведено їх детальний аналіз (раціональний дизайн) за допомогою сучасних комп'ютерних методів (молекулярний докінг, прогноз фармакокінетики та токсичності) з метою виявлення потенційних лікарських засобів. Визначено найбільш перспективні сполуки для подальших біологічних досліджень, зокрема для оцінки нейропротекторної, гепатопротекторної та протимікробної дії;
- Змодельовані та теоретично обґрунтовані механізми протікання реакцій гетероциклізації, наприклад (3Н-хіназолін-4-іліден)гідразидів гетарилкарбонових кислот, нуклеофільного розщеплення 2-гетарил[1,2,4]триазоло[1,5-с]хіназолінів, гетероциклізації 2-(3-гетарил-1,2,4-триазол-5-іл)анілінів з циклогексаноном, тощо;
- На основі проведенних досліджень оновлено курси лекцій: «Органічна хімія», «Хімія гетероциклічних сполук», «Сучасні методи синтезу та ідентифікації біологічно активних сполук», «Методи ідентифікації органічних сполук», «Хімія синтетичних нітроген- та сульфурвмісних гетероциклів»

Результати діяльності школи є початковим етапом до створення нових вітчизняних ліків для лікування поширених захворювань, включаючи наслідки стресу та травм, що особливо актуально для реабілітації ветеранів війни.