

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0212U005778

**Державний реєстраційний номер:** 0111U002530

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 28-12-2012

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 2

**Назва етапу:** Вивчення впливу синтезованих сполук на кінетику протеїназного каталізу, дослідження специфічності дії сполук на ферменти-мішені, оцінка впливу деяких фізико-хімічних показників сполук на їх фармакокінетику.

**Початок етапу:** 01.2012

**Закінчення етапу:** 12.2012

**Вид звітнього документа:** Проміжний звіт

## III. Відомості про виконавця ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 03563790

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** 558-52-66, 573-25-52

## IV. Відомості про співвиконавців ДіР

## V. Відомості про замовника ДіР

**Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи):** Національна академія наук

**Код за ЄДРПОУ:** 02033333

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київ, 01601, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Розмір організації:**

**Телефон:** (044) 234-32-43

## 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:** 2.1 - фундаментальні дослідження

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

**Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК):** 6541030

|                                                         |
|---------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 1767.4 |
|---------------------------------------------------------|

## **VII. Відомості про ДіР**

### **Назва роботи українською:**

Вивчення зв'язку структурних особливостей низькомолекулярних регуляторів активності гідролаз з їх біологічною активністю

### **Назва роботи англійською:**

Study of the relationship of structural features of low-molecular weight regulators of the activity of hydrolases to their biological activity

### **Реферат українською:**

Створено модифіковану версію популярного програмного пакету AutoDock 4.2, що на відміну від оригінальної дозволяє досліджувати докінг "гнучких" інгібіторів у активний центр ферментів, що мають велику порожнину. Крім більш відповідних до експериментальних енергій та способів зв'язування, новий варіант AutoDock потребує значно менших комп'ютерних потужностей. Показано високу селективність до тромбіну ліпоретро-D- пептидів, що містять залишок жирної кислоти. Взаємодія гідрофобних ланцюгів з петлею тромбіну 60 грає ключову роль в зв'язуванні інгібіторів.

### **Реферат англійською:**

It was created a modified version of the popular program package AutoDock 4.2, which is unlike the original software allows docking of "flexible" inhibitors into the active site of enzymes that have a large cavity. In addition to more relevant to experimental energies and binding mode, the new version of AutoDock requires significantly less computing power. The program can be used to search for new enzyme inhibitors (virtual screening) and to investigate the mechanism of action of already known inhibitors. Research has shown high selectivity liporetro-D-peptides, containing the fatty acid residue, to thrombin. Interaction of hydrophobic chains with thrombin loop 60 plays a key role in the binding of inhibitors.

**Індекс УДК:** 577.21:576.314;576.52;577.352, 577.21; 576.314; 577.352

**Коди тематичних рубрик:** 34.15.37

### **Керівники роботи**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:** Прокопенко Володимир Володимирович

**Науковий ступінь:**

**Вчене звання:**

**Ідентифікатор ORCID ID:**

**Додаткова інформація:**

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

**Назва НТП українською:** Нові наукові знання щодо молекулярних механізмів, що лежать в основі взаємодії ензимів з їх лігандами

**Назва НТП англійською:** New scientific knowledge about the molecular mechanisms underlying the interaction between enzymes and their ligands

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:**

**Галузь застосування:** медицина, фармакологія

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Показано, що культура опортуністичного гриба *Candida albicans* може слугувати універсальною моделлю для скринінгу і подальшого пошуку сполук – інгібіторів фарнезилдіфосфат-синтази.

**Соціально-економічна спрямованість НТП:**

**Вплив НТП на довкілля:**

**Впровадження НТП:** Не впроваджено

**Практична реалізація НТП**

**Початок етапу:** Визначаються НАН України

**Закінчення етапу:**

**Споживачі продукції:** НДУ та вищі учбові заклади хімічного, біологічного та медичного профілю

**Перспективні ринки:** Україна, країни СНД

**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**

## **Х. Заключні відомості**

**Керівник юридичної особи**

Кухар Валерій Павлович

### **Перелік осіб-виконавців**

І.В.Семенюта

В.В.Ковалішин

В.М.Благодатний

В.Ю.Танчук

Л.Є.Калашнікова

Л.Л.Чарочкіна

Л.О.Метелиця

О.М.Ляхов

О.О.Поярков

С.Є.Могилевич

Т.М.Кашева

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Телефон**

**Реєстратор**

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

