

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U100248

Державний реєстраційний номер: 0115U002945

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-01-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Тестування інгібувальної активності відібраних хімічних сполук на *SerPC S. aureus* in vitro. Розробка моделі зв'язування інгібіторів із активним центром *SerPC S. aureus*.

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут молекулярної біології і генетики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження: вул. Акад. Заболотного, 150, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442000356, 380445261169

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594, 380442343243

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

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 102
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Мішень-спрямований пошук інгібіторів аміноацил-тРНК синтетаз із селективною дією проти збудників інфекційних хвороб людини

Назва роботи англійською:

Target-specific search of aminoacyl-tRNA synthetases inhibitors with selective action against agents cause human infections diseases.

Реферат українською:

У результаті виконання роботи одержано рекомбінантний аналог СерРС *S. aureus*. Проведено тестування 52 сполук, відібраних за результатами молекулярного докінгу, на інгібувальну активність щодо СерРС *S. aureus*. Серед них ідентифіковано 3 сполуки, що пригнічують активність СерРС на 25%. Ці сполуки мають антибактеріальну активність щодо метицилін-резистентного штаму *S. aureus* ATCC43300. Проведено розрахунок молекулярної динаміки двох найефективніших інгібіторів із активним сайтом СерРС *S. aureus*. Структури цих сполук-хітів будуть у подальшому використані для хімічної оптимізації з метою пошуку більш активних інгібіторів СерРС *S. aureus*.

Реферат англійською:

As a result of the work, a recombinant *S. aureus* seryl-tRNA synthetase (SerRS) was obtained. 52 compounds selected according to molecular docking results, were tested for inhibitory activity toward *S. aureus* SerRS. Among them, three compounds inhibiting SerRS by 25% were identified. These compounds possess antibacterial activity against methicillin resistant *S. aureus* strain ATCC43300. The molecular dynamics of the complexes of the most effective inhibitors with the active site of *S. aureus* SerRS was performed. The structures of these hit compounds will be further used for chemical optimization to find more active inhibitors of *S. aureus* SerRS.

Індекс УДК: 577.21, 577.21, 577.217.32+577.217.335+577.322

Коди тематичних рубрик: 34.15.17, 34.15.25

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Тукало Михайло Арсентійович

Науковий ступінь: д. б. н.

Вчене звання: професор, акад.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Інгібітори рекомбінантної серил-тРНК синтетази *Staphylococcus aureus*

Назва НТП англійською: Inhibitors of recombinant *Staphylococcus aureus* seryl-tRNA synthetase

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Низькомолекулярні інгібітори серил-тРНК синтетази *Staphylococcus aureus*, що знижують активність ензиму на 25% при концентрації 100 мкМ та пригнічують ріст метицилін-резистентного штаму *Staphylococcus aureus* ATCC43300 в діапазоні від 51,2 % до 85,8% при концентрації 32 мг/л.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Volynets G.P., Tukalo M.A., Bdzhola V.G., Derkach N.M., Gumeniuk M.I., Tarnavskiy S.S., Starosyla S.A., Yarmoluk S.M. Benzaldehyde thiosemicarbazone derivatives against replicating and nonreplicating *Mycobacterium tuberculosis*. J. Antibiot (Tokyo) 2019, Vol. 72, No. 4, P. 218-224.

Volynets G.P., Starosyla S.A., Rybak M.Yu., Bdzhola V.G., Kovalenko O.P., Vdovin V.S., Yarmoluk S.M., Tukalo M.A. Dual-targeted hit identification using pharmacophore screening. J. Comput.-Aided Mol. Des. 2019, Vol. 33, P. 955-964.

Kovalenko O.P., Volynets G.P., Rybak M.Yu., Starosyla S.A., Gudzera O.I., Lukashov S.S., Bdzhola V.G., Yarmoluk S.M., Boshoff H., Tukalo M.A. Dual-targeted inhibitors of mycobacterial aminoacyl-tRNA synthetases among N-benzylidene-N'-thiazol-2-yl-hydrazines. Med. Chem. Comm. 2019, Vol. 10, P. 2161-2169.

Х. Заключение відомості

Керівник юридичної особи

Тукало Михайло Арсентійович
д. б. н., 03.00.03

Перелік осіб-виконавців

Бджола Володимир Григорович
(к.х.н., 02.00.01, 03.00.03)

Волинець Галина Петрівна
(к. б. н., 03.00.20)

Гудзера Ольга Йосипівна

Дудченко Тарас Миколайович
(к. б. н.)

Коваленко Оксана Петрівна

Крикливий Іван Андрійович

Лукашов Сергій Степанович

Рибак Марія Юріївна

Тукало Михайло Арсентійович
(д. б. н.)

Яремчук Ганна Дмитрівна
(к.б.н., 03.00.03)

Ярмолюк Сергій Миколайович
(д.х.н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Крикливий Іван Андрійович

Телефон

+38 (044) 526-55-89

Реєстратор

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

