

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U003057

Державний реєстраційний номер: 0110U006120

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-01-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 5

Назва етапу: Дизайн і синтез нової групи синтетичних інгібіторів. Перевірка біологічної активності інгібіторів з оптимізованою структурою *in vitro* та *in vivo* з використанням тестувальних штамів *E. coli*

Початок етапу: 01.2014

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (044) 526-11-69, (044) 526-07-59

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.): 115.4
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка технології мішень-специфічного пошуку інгібіторів аміноацил-тРНК синтетаз з селективною дією проти збудників інфекційних хвороб людини.

Назва роботи англійською:

Development for technology target-specific search of aminoacyl-tRNA synthetases inhibitors with selective action against specific human infections.

Реферат українською:

За допомогою методів комп'ютерного моделювання передбачено ключові взаємодії похідних N-бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразину з амінокислотними залишками в активному сайті лейцил-тРНК синтетази (ЛейРС) *Mycobacterium tuberculosis*. Проведено синтез і тестування 26 похідних N-Бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразинів. Знайдено дві сполуки з поліпшеною активністю стосовно патогенного ензиму зі значеннями IC50 = 2,27 та 4,54 мМ. Досліджено антитуберкульозну активність інгібіторів лейцил-тРНК синтетази *M. tuberculosis* із класу N-Бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразинів на штамі Mtb H37Rv. Виявлено, що найактивніша сполука пригнічувала ріст мікобактерій на 90% при концентрації 13,53 мМ.

Реферат англійською:

The binding mode of N-Benzylidene-N'-thiazol-2-yl-hydrazine in the active site of leucyl-tRNA synthetase (LeuRS) *Mycobacterium tuberculosis* has been predicted using molecular docking techniques. We have synthesized and tested in vitro 26 derivatives of N-Benzylidene -N'-thiazol-2-yl-hydrazine. As a result, two compounds possessing inhibitory activity toward pathogenic enzyme with IC50 values of 2,27 and 4,54 мМ have been identified. Several inhibitors of LeuRS from this chemical class have been tested on Mtb H37Rv. The most active compound inhibited the growth of the cells with IC90 of 13,53 мМ.

Індекс УДК: 577.21, 577.217.32+577.217.335+577.322

Коди тематичних рубрик: 34.15.17

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: Технологія мішень-специфічного пошуку інгібіторів лейцил-тРНК синтетази *M. tuberculosis* (ЛейРСМТ) із селективною дією проти збудників туберкульозу людини.

Назва НТП англійською: The technology of target-oriented rational design of leucyl-tRNA synthetase *M. tuberculosis* (LeuRSMt) inhibitors which are selective toward causative agent of human tuberculosis

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі аналізу взаємодії різних похідних N-бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразину з амінокислотними залишками активного центру ЛейРСМТ синтезовано 26 його структурних аналогів. В результаті тестування *in vitro* знайдено дві сполуки з поліпшеною активністю стосовно патогенного ензиму зі значеннями $IC_{50} = 2,27$ та $4,54$ мкМ. Досліджено протитуберкульозну активність інгібіторів лейцил-тРНК синтетази *M. tuberculosis* із класу N-Бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразинів на клітинах *M. tuberculosis* штамі H37Rv. Виявлено, що найактивніша сполука пригнічувала ріст мікобактерій на 90% при концентрації 13,53 мкМ.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: медичні установи

Перспективні ринки: Україна, світ

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

Єльська Ганна Валентинівна

д. б. н.

Перелік осіб-виконавців

Бджола Володимир Григорович

Бояршин Костянтин Сергійович

Волинець Галина Петрівна

Гудзера Ольга Йосипівна

Дудченко Тарас Миколайович

Крикливий Іван Андрійович

Коваленко Оксана Петрівна

Яремчук Ганна Дмитрівна

Ярмолюк Сергій Миколайович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

