

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U008100

Державний реєстраційний номер: 0115U002945

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-12-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Оптимізація інгібіторів лейцил-тРНК синтетази (ЛейРС) *Mycobacterium tuberculosis*.

Напрацювання рекомбінантного аналога ЛейРС *M. tuberculosis*. Створення надпродуцента ЛейРС людини і напрацювання рекомбінантного білка.

Початок етапу: 04.2015

Закінчення етапу: 12.2015

Вид звітнього документа: Проміжний 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.): 89.5

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:

З метою оптимізації інгібіторів ЛейРС *M. tuberculosis* досліджено взаємодію 334 похідних класу N-Бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразинів з активним сайтом ензиму з використанням методів комп'ютерного моделювання. Для біохімічного тестування відібрано 37 перспективних сполук. Для пошуку інгібіторів ЛейРС *M. tuberculosis* серед інших хімічних класів, здійснено віртуальний скринінг бібліотеки (>100 000 лігандів) у активний центр ЛейРС *M. tuberculosis*. На основі даних молекулярного докінгу відібрано для візуального аналізу 5012 лігандів. Ген цитоплазматичної ЛейРС людини (ЛейРСНs) клоновано до клітин *E. coli*, Rosetta DE3 із використанням плазміди рЕТ16. Проведено пошук умов ефективної експресії і створено надпродуцент для отримання ферменту. Розроблено методики виділення і очищення ЛейРСНs і напрацьовано фермент чистотою > 95% у препаративних кількостях. За раніше розробленими методиками виділено та очищено ЛейРС *M. tuberculosis* у кількостях достатніх для порівняльних досліджень.

Реферат англійською:

In order to discover more effective inhibitors of *M. tuberculosis* LeuRS among the derivatives of N-Benzylidene-N'-thiazol-2-yl-hydrazine we have performed molecular docking of the compound library containing 334 derivatives of this chemical scaffold targeting the active site of enzyme. After the docking followed by visual inspection of the complexes, 37 compounds were selected for biochemical testing of their inhibitory activity toward *M. tuberculosis* LeuRS. For *M. tuberculosis* LeuRS inhibitors search among other chemical classes we have carried out virtual screening of compound library containing more than 100,000 compounds. Based on the data of molecular docking we have selected 5012 ligands for visual inspection. The gene of cytoplasmic human LeuRS was cloned in the expression vector pET16 and the human LeuRS was expressed in *E. coli*, Rosetta DE3. We have picked up conditions for effective expression and constructed overproducer of the enzyme. The procedures for obtaining and purification of human LeuRS (>95%) in preparative amounts have been developed. We have obtained *M. tuberculosis* LeuRS in sufficient amounts by using earlier developed methods.

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: Надпродуцент цитоплазматичної лейцил-тРНК синтетази людини; похідні N-Бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразину.

Назва НТП англійською: Overproducer of the cytoplasmic human Leucyl-tRNA synthetases; derivatives of N-Benzylidene-N'-thiazol-2-yl-hydrazine.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: З використанням методів комп'ютерного моделювання досліджено взаємодію 334 похідних класу N-Бензиліден-N'-тіазол-2-іл-гідразинів з активним сайтом ЛейРС M. tuberculosis. Для біохімічного тестування відібрано 37 перспективних сполук. На основі даних молекулярного докінгу відібрано для візуального аналізу 5012 лігандів інших хімічних класів. Ген цитоплазматичної ЛейРС людини (ЛейРСНs) клоновано в плазміді рЕТ16 і трансформовано до клітин E. coli, Rosetta DE3. Проведено пошук умов ефективної експресії і створено надпродуцент для отримання ферменту. Розроблено методики виділення і очищення ЛейРСНs і напрацьовано фермент чистотою > 95% у препаративних кількостях.

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

Перелік осіб-виконавців

Бджола Володимир Григорович

Бояршин Костянтин Сергійович

Волинець Галина Петрівна

Гудзера Ольга Йосипівна

Дудченко Тарас Миколайович

Крикливий Іван Андрійович

Коваленко Оксана Петрівна

Лукашов Сергій Степанович

Яремчук Ганна Дмитрівна

Ярмолюк Сергій Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

