

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0217U001537

Державний реєстраційний номер: 0116U006100

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-02-2017

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Використання Грід та напрацювань віртуальної організації CSLabGrid для високопропускового скринінгу інгібіторів тубуліну паразитичних грибів

Початок етапу: 04.2016

Закінчення етапу: 12.2016

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державна установа "Інститут харчової біотехнології та геноміки НАН України"

Код за ЄДРПОУ: 02128514

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (044) 434-37-77

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 100
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Використання Грід та напрацювань віртуальної організації CSLabGrid для високопропускового скринінгу інгібіторів тубуліну паразитичних грибів

Назва роботи англійською:

Using the Virtual GRID and organization CSLabGrid for high pass tubulin inhibitor screening parasitic fungi

Реферат українською:

За результатами високопропускового віртуального скринінгу більш ніж 7 млн речовин із використанням пакету UCSF Dock 6 (IFBG Cluster) було відібрано 200 перспективних речовин. На підставі аналізу оціночних функцій докінгу в CCDC Gold, а також візуальної оцінки побудованих комплексів, відібрано 30 найбільш перспективних сполук - потенційних інгібіторів тубулінів паразитичних грибів. Як найбільш перспективними для подальшого лабораторного дослідження in vitro, визначено 19 сполук синтезованих в Інституті органічної хімії НАН України.

Реферат англійською:

As a result of high bandwidth virtual screening of more than 7 million substances using UCSF Dock Pack 6 (IFBG Cluster) 200 promising substances were selected. Based on the analysis of evaluation functions in docking CCDC Gold, as well as visual assessment built complexes, selected 30 of the most promising compounds - potential inhibitors of tubulin parasitic fungi. As the most promising for further laboratory studies in vitro, identified 19 compounds synthesized at the Institute of Organic Chemistry National Academy of Sciences of Ukraine.

Індекс УДК: 004.942, 004.75:004.942

Коди тематичних рубрик: 81.14.10.07

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Блюм Ярослав Борисович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Перспективні сполуки – потенційні інгібітори тубулінів паразитичних грибів.

Назва НТП англійською: Promising compounds – potential inhibitors of tubulin parasitic fungi.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Біологія, медицина, ветеринарія.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Скринінг проводився в два відомих сайти зв'язування для кожної із досліджуваних моделей тубулінів паразитичних грибів. Обрахунок молекулярного докінгу здійснювався за допомогою програми UCSF Dock 6 з одночасним використанням декількох обчислювальних серверів IFBG Cluster. База лігандів була підготовлена таким чином, щоб для всіх речовин були розраховані тривимірні структури та окремо були генеровані парціальні заряди AM1-bcc засобами програми Морас7.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: не визначені

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: –

Перспективні ринки: Україна, країни СНД, Євросоюзу

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): не визначений

Додаткова інформація: не визначені

IX. Бібліографічний опис

1.Карпов П.А., Демчук О.М., Брицун В.М., Литвин Д.І., Пидюра М.О., Раєвський О.В., Самофалова Д.О., Співак С.І., Волочнюк Д.М., Ємець А.І., Блюм Я.Б. Нові імідазольні похідні як інгібітори FtsZ-білків мікобактерій: від високопропускового молекулярного скринінгу в Грід до експериментального аналізу in vitro // Nauka innov. 2016, 12(3): 44-59; <http://dx.doi.org/10.15407/scin12.03.044>. 2.Блюм Я.Б., Карпов П.А. Ефективність використання потенціалу ґрід для високопропускового віртуального скринінгу біологічно активних речовин

// Вісник Національної академії наук України. – 2016. – № 8. – С. 68–72. 3. Самофалова Д.А., Карпов П.А., Блюм Я.Б. Особливості ліганд-білкової взаємодії інгібіторів протеїнфосфатаз, потенційно пов'язаних з цитоскелетом // Фактори експериментальної еволюції організмів. 2016, Том. 19. С.229–233. 4. Демчук О.М., Карпов П.А., Ожерєдов С.П., Співак С.І., Пидюра М.О., Самофалова Д.О., Блюм Я.Б. Створення та наповнення бази даних цитоскелетних білків віртуальної організації SCLabGrib тривимірними структурами тубуліну // Фактори експериментальної еволюції організмів. 2016, Том. 19. С.208–211.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Блюм Ярослав Борисович

д. б. н.

Перелік осіб-виконавців

Демчук О.М.

Карпов П.А.

Ожерєдов С.П.

Раєвський О.В.

Самофалова Д.О.

Співак С.І.

Відповідальний за підготовку

облікових документів

Телефон

Реєстратор

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

