

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U002532

Державний реєстраційний номер: 0117U002792

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-04-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

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

Початок етапу: 04.2017

Закінчення етапу: 12.2017

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.): 89

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

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

Назва роботи англійською:

Using GRID and organization CSLabGrid for high-throughput screening for inhibitors of tubulin pathogenic fungi

Реферат українською:

Здійснена реконструкція просторової структури 82-х альфа-тубулінів, 111-ти бета-тубулінів і 47-ми гама-тубулінів, що належали представникам 62-х видів фітопатогенних грибів. Усі моделі пройшли етап короточасної молекулярної динаміки (1 нс) в програмі Gromacs (IFBG Cluster) і були депоновані до штатної бази даних ВО CSLabGrid – CSMoDB.

Реферат англійською:

The spatial structure of 82 alpha-tubulins, 111 beta-tubulins and 47 gamma-tubulins belonging to representatives of 62 species of phytopathogenic fungi was reconstructed. All models underwent a stage of short-term molecular dynamics (1 ns) in the Gromacs program (IFBG Cluster) and were deposited in the CSLabGrid's regular database, CSMoDB.

Індекс УДК: 004.49; 004.056.57, 004.75:004.942

Коди тематичних рубрик: 50.41.25

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: Відібрано 50 речовин-лідерів, що мають спорідненість до сайту зв'язування таксолу (27 сполук) і ГТФ/ГДФ-обмінного сайту (23 сполуки) тубуліну фітопатогенних грибів.

Назва НТП англійською: 50 lead substances with an affinity for the taxol binding site (27 compounds) and the GTP / GDF exchange site (23 compounds) of the tubulin of phytopathogenic fungi were selected.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Біологія, сільське господарство

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: За результатами молекулярного докінгу сполук-лідерів у ГТФ/ГДФ-обмінний сайт тубуліну найбільша спорідненість ліганду і мішені спостерігалась у випадку сполук F0478-0265, B0367 і а-тубуліну, а також сполук B0066, F0478-0271 і B0114 і b-тубуліну із *Puccinia triticina*. За результатами молекулярного докінгу сполук-лідерів у таксол-зв'язуючий сайт b-тубуліну найбільша спорідненість ліганду до мішені спостерігалась у випадку сполук F0478-0219, F0478-0166 і b-тубуліну *Puccinia graminis* f. sp. *Tritici* (A:), а також сполуки F0478-0385 і b-тубуліну *Magnaporthe oryzae*.

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

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Блюм Ярослав Борисович

д. б. н.

Перелік осіб-виконавців

Демчук О.М.

Карпов П.А.

Ожередов С.П.

Раєвський О.В.

Співак С.І.

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

