

# Облікова картка ДіР



## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0218U002000

**Державний реєстраційний номер:** 0115U002945

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 02-01-2018

## II. Етап виконання ДіР

**Номер етапу:** 3

**Назва етапу:** Побудова гомологічної моделі серил-тРНК синтетази (SerPC) *Staphylococcus aureus*.

Дослідження особливостей сайтів зв'язування аміноацил-аденілатів та тРНК і порівняння з ензимом людини

**Початок етапу:** 01.2017

**Закінчення етапу:** 12.2017

**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

## 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

|                                                       |
|-------------------------------------------------------|
| <b>Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.):</b> 91.1 |
|-------------------------------------------------------|

## 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:

Побудовано гомологічні моделі серил-тРНК синтетази *Staphylococcus aureus* за допомогою трьох веб-серверів - Swiss-Model, Phyre2, I-TASSER та програми Modeller9.17. Досліджено структурні особливості цих моделей та проведено їх суперпозицію із цитоплазматичною серил-тРНК синтетазою людини. За використання веб-сервера MolProbity проведено оцінку гомологічних моделей за низкою параметрів. За даними MolProbity, найкращі показники продемонстрували гомологічні моделі, згенеровані за допомогою веб-сервера Swiss-Model на основі кристалічних структур серил-тРНК синтетази *Aquifex aeolicus* VF5 (PDB ID: 2DQ3) та цитоплазматичної серил-тРНК синтетази людини (PDB ID: 4RQE). Остання гомологічна модель була використана для порівняння її сайтів зв'язування тРНК та аміноациладенілату з ензимом людини. Ідентифіковано структурні особливості, які слід враховувати для розробки інгібіторів селективних щодо бактеріальної серил-тРНК синтетази.

### Реферат англійською:

Homology models of seryl-tRNA synthetase from *Staphylococcus aureus* have been built using three web-servers - Swiss-Model, Phyre2, I-TASSER and the program Modeller9.17. The structural features of these models have been investigated. The models have been superimposed on the human cytoplasmic seryl-tRNA synthetase. Obtained homology models have been evaluated using web-server MolProbity. Accordingly to the MolProbity data, the homology models which were generated with Swiss-Model server based on the crystal structures of seryl-tRNA synthetase from *Aquifex aeolicus* VF5 (PDB ID: 2DQ3) and human cytoplasmic seryl-tRNA synthetase (PDB ID: 4RQE), have demonstrated the best quality. The last one was taken for comparison of its tRNA- and aminoacyl-adenylate binding sites with human enzyme. Several structural features have been identified which should be taken into account during development of inhibitors with selective action toward bacterial seryl-tRNA synthetase

**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:** Гомологічна модель структури серил-тРНК синтетази *Staphylococcus aureus*.

**Назва НТП англійською:** Homology model of *Staphylococcus aureus* seryl-tRNA synthetase.

**НТП, яку передбачалося створити:**

**Причини, через які НТП не було створено:**

**Отримані результати:**

**Галузь застосування:** Медицина

**Реєстраційний номер картки технології:**

**Опис НТП:** Побудовано гомологічні моделі серил-тРНК синтетази *Staphylococcus aureus*, досліджено сайти зв'язування тРНК і аміноациладенілату в порівнянні з ензимом людини

**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**

Gudzera O. I., Golub A.G., Bdzhola V. G. et al. Discovery of potent anti-tuberculosis agents targeting leucyl-tRNA synthetase // Bioorganic & Medicinal Chemistry. 2016 . v. 24, pp. 1023-131

## **Х. Заключні відомості**

### **Керівник юридичної особи**

Єльська Ганна Валентинівна

### **Перелік осіб-виконавців**

Бджола Володимир Григорович

Волинець Галина Петрівна

Гудзера Ольга Йосипівна

Дудченко Тарас Миколайович

Крикливий Іван Андрійович

Коваленко Оксана Петрівна

Лукашов Сергій Степанович

Раєвський Олексій Володимирович

Рибак Марія Юріївна

Яремчук Ганна Дмитрівна

Ярмолюк Сергій Миколайович

### **Відповідальний за підготовку облікових документів**

### **Телефон**

### **Реєстратор**

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

