

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U002188

Державний реєстраційний номер: 0112U007642

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 17-01-2013

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розроблення і впровадження методик застосування мішень орієнтованих досліджень для здійснення первинного скринінгу молекул потенційних антибактеріальних агентів

Початок етапу: 11.2012

Закінчення етапу: 12.2012

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): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2393141

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: 2.4 - розробки найважливіших новітніх технологій за державним замовленням

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 5031070

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 850
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розроблення і впровадження методик застосування мішень орієнтованих досліджень для здійснення первинного скринінгу молекул потенційних антибактеріальних агентів

Назва роботи англійською:

Development and application of target oriented methods for initial screening of molecules as potencial antibacterial agents.

Реферат українською:

Визначено дві перспективні молекулярні мішені для розробки нових антибактеріальних препаратів: проліл-тРНК синтетаза *Enterococcus faecalis* та лейцил-тРНК синтетаза *Mycobacterium tuberculosis*. Досліджено особливості просторової будови сайту зв'язування мішеней (лейцил- і проліл-тРНК синтетаз патогенних організмів), проведено пошук інгібіторів шляхом рецепторно-орієнтованого віртуального скринінгу та одержано результати для колекції 100 000 органічних сполук. Синтезовано близько 500 похідних хіноліну для збагачення бібліотеки органічних сполук речовинами з потенційною антибактеріальною дією. Розроблені методики експресії і одержання рекомбінантних ферментів-мішеней для біохімічних тестів та розроблені методики тестів *in vitro* для визначення активності дії на них досліджуваних органічних сполук.

Реферат англійською:

The two promising molecular targets for the development of new antibacterial drugs have been revealed: prolyl-tRNA synthetase *Enterococcus faecalis* and leucyl-tRNA synthetase *Mycobacterium tuberculosis*. The features of the spatial structure of the binding sites of targets (leucyl and prolyl-tRNA synthetases pathogenic organisms) have been investigated, the receptor-based virtual screening was performed and results for the 100 000 organic compounds have been obtained. About 500 quinoline derivatives have been synthesized to enrich the compound library by substances with potential antibacterial activity. The methods of expression and obtaining of recombinant target enzymes for biochemical tests and methods of *in vitro* tests to determine the activity of studied organic compounds have been developed.⁵⁴⁸¹

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: Методики застосування мішеней орієнтованих досліджень для здійснення первинного скринінгу молекул потенційних антибактеріальних агентів

Назва НТП англійською: Methods of target oriented research for initial screening of molecules as potential antibacterial agents.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Досліджено особливості просторової будови сайту зв'язування мішеней (лейцил- і проліл-тРНК синтетаз патогенних організмів), проведено пошук інгібіторів шляхом рецепторно-орієнтованого віртуального скринінгу та одержано результати для колекції 100 000 органічних сполук. Синтезовано близько 500 похідних хіноліну для збагачення бібліотеки органічних сполук речовинами з потенційною антибактеріальною дією. Розроблені методики експресії і одержання рекомбінантних ферментів-мішеней для біохімічних тестів та розроблені методики тестів in vitro для визначення активності дії на них досліджуваних органічних сполук. Це значно скорочує кількість високовартісних і трудомістких експериментів для пошуків ліків нового покоління.

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

4. Крикливий Іван Андрійович
Бджола Володимир Григорович
Бояршин Костянтин Сергійович
Волинець Галина Петрівна
Грищенко Андрій Анатолійович
Гудзера Ольга Йосипівна
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**

