

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0213U006844

Державний реєстраційний номер: 0110U006120

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-01-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Оптимізації структури активних сполук, розробка моделі взаємодії отриманих інгібіторів з ферментами. Кристалізація і рентгеноструктурний аналіз комплексів ПроРС E.faecalis і ЛейРС M. tuberculosis з найбільш активними інгібіторами.

Початок етапу: 01.2013

Закінчення етапу: 12.2013

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.): 115.4
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка технології мішень-специфічного пошуку інгібіторів аміноацил-тРНК синтетаз з селективною дією проти збудників інфекційних хвороб людини.

Назва роботи англійською:

Development for technology target-specific search of aminoacyl-tRNA synthetases inhibitors with selective action against specific human infections.

Реферат українською:

В процесі виконання роботи досліджено комплекси синтетичних інгібіторів з лейцил т-РНК синтетазою (ЛейРС) *Mycobacterium tuberculosis* та проліл т-РНК синтетазою (ПроРС) *Enterococcus faecalis*. Грунтуючись на типах зв'язування трьох найбільш активних інгібіторів, отриманих за допомогою, молекулярного докінгу, побудовано фармакофорну модель, яка може бути використана для подальшого пошуку інгібіторів ЛейРС *M. tuberculosis*. Відібрано 72 аналоги найбільш перспективного інгібітора ЛейРС *M. tuberculosis* та протестовано *in vitro*. Знайдено дві сполуки з поліпшеною інгібувальною активністю. Запропоновано метод кристалізації ЛейРС і ПроРС із інгібіторами.

Реферат англійською:

The complexes of synthetical inhibitors with leucyl-tRNA synthetase (LeuRS) *Mycobacterium tuberculosis* and prolyl-tRNA synthetase (ProRS) *Enterococcus faecalis* were investigated. Based on the binding modes of three the most active compounds, obtained with molecular docking, we have built pharmacophore model which can be used for further search of inhibitors LeuRS *M. tuberculosis*. 72 analogs of the most perspective inhibitor of LeuRS *M. tuberculosis* were selected and tested. It was found two inhibitors with better activity against LeuRS *M. tuberculosis*. The method for crystallization of LeuRS and ProRS with synthetical inhibitors was proposed.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: Рецепторно-залежна фармакофорна модель взаємодії ЛейРС M. tuberculosis із інгібіторами. Метод кристалізації ЛейРС M. tuberculosis і ПроРС E. faecalis із інгібіторами.

Назва НТП англійською: Receptor based pharmacophore model of interaction of LeuRS M. tuberculosis with inhibitors. The method for crystallization of LeuRS and ProRS with synthetical inhibitors.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: На основі знайдених нових класів інгібіторів ЛейРС M. tuberculosis було розроблено рецепторно-залежну фармакофорну модель взаємодії ЛейРС M. tuberculosis із інгібіторами, використання якої прискорить подальші пошуки інгібіторів завдяки безпосередньому скринінгу локальної програми Pharmer, що на порядок швидше, ніж більшість методів скринінгу. Запропоновано метод кристалізації ЛейРС M. tuberculosis і ПроРС E. faecalis із інгібіторами.

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

Бджола Володимир Григорович

Бояршин Костянтин Сергійович

Волинець Галина Петрівна

Гудзера Ольга Йосипівна

Дудченко Тарас Миколайович

Крикливий Іван Андрійович

Коваленко Оксана Петрівна

Яремчук Ганна Дмитрівна

Ярмолюк Сергій Миколайович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

