

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0219U102013

Державний реєстраційний номер: 0119U103067

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-12-2019

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Проведення досліджень щодо аналізу літературних даних та створенню навчальної вибірки сполук як інгібіторів *Acinetobacter baumannii*

Початок етапу: 09.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03563790

Місцезнаходження: вул. Мурманська, 1, м. Київ, Київська обл., 02094, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380445585388, 380445599800

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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): 2201380

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 109
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Нові низькомолекулярні біорегулятори як ефективні агенти проти мультирезистентних клінічних ізолятів *Acinetobacter baumannii* у дослідженнях *in silico* та *in vitro*.

Назва роботи англійською:

New low-molecular bioregulators as effective agents against multidrug resistant *Acinetobacter baumannii* clinical isolate: *in silico* and *in vitro* studies

Реферат українською:

За допомогою пошукових Інтернет-ресурсів ChEMBL та PubChem було відібрано та проаналізовано більш як 200 наукових робіт та створено вибірки сполук для подальшого аналізу даних щодо відомих інгібіторів чутливих та резистентних штамів бактерії *A. baumannii*. Для кожної вибірки даних створено загальну таблицю, що містить інформацію про склад та джерело інформації. Порядок підготовки даних та внесення в базу OCHEM виконано за стандартною процедурою. Для введення даних в базу QCHEM на першому етапі за допомогою вікна браузера було створено нову властивість під іменем "AcinBaum_MIC". Початкова інформація про активність сполук вводились в нМ або мг/мл та конвертувались в логарифмічні значення одиниць вимірювання. Детальний аналіз літературних джерел дозволив зформувати базу даних хімічних сполук, що налічує більш як 3 тисячі молекул із різним потенціалом активності проти *Acinetobacter baumannii*. Дані є доступними на сайті OCHEM та є основою для подальшої розробки QSAR моделей.

Реферат англійською:

More than 200 scientific articles were chosen to analyze and create a data set of compounds as inhibitors of sensitive and resistant strains of the bacterium *A. baumannii* using the search Internet resources ChEMBL and PubChem, The procedure for preparation and introduction of the obtained data was carried out according to the standard procedure. The new module "AcinBaum MIC" was created in the QCHEM database using a browser window. Initial information on the activity of the compounds was introduced into nmol or mg/ml and then converted to logarithmic values. Detailed analysis of references allowed to form a data base of 3000 chemical compounds with different antibacterial potential against *A. baumannii*. The generated data are available on the OCHEM website and are the basis for further development of QSAR models.

Індекс УДК: 577.2

Коди тематичних рубрик: 34.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Метелиця Лариса Олексіївна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: База даних хімічних сполук як інгібіторів бактерії *Acinetobacter baumannii*

Назва НТП англійською: *Acinetobacter baumannii* inhibitors chemical database

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: медична хімія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: За результатами аналізу більше 200 статей, обраних за базами молекулярних структур ChEMBL та PubChem ідентифіковано майже 3000 сполук, активних проти мікробного патогену *A. baumannii*. На основі отриманої інформації створено широку базу опублікованих експериментальних про їх антибактеріальну активність щодо *Acinetobacter baumannii*. Всі відібрані сполуки наразі збережені на сервері OCHEM за такими стандартними характеристиками, як ідентифікація сполуки, хімічна та структурна формули, сполука у форматі SMILES, антибактеріальна активність у значеннях MIC (мінімальна інгібуюча концентрація).. Таким чином, модуль бази OCHEM після автоматичної перевірки наявності дублікатів та одночасного редагування записів адекватно та якісно виконав пакетне завантаження даних у вигляді файлів Microsoft Excel або SDF із посиланням та можливістю відстежуванням оригінального джерела інформації для успішного подальшого використання.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 09.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Споживачі продукції: Міністерство освіти і науки України

Перспективні ринки: Європа, Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Ivan V. Semenyuta, Oleksandr L. Kobzar Diana M. Hodyna, Volodymyr S. Brovarets, Larysa O. Metelytsia / In silico study of 4-phosphorylated derivatives of 1,3-oxazole as inhibitors of Candida albicans fructose-1,6-bisphosphate aldolase II. // Heliyon. – 2019. – V.5. – №4. – P. 1-26.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Вовк Андрій Іванович
д. х. н., 02.00.10

Перелік осіб-виконавців

Година Діана Миколаївна
(к.б.н., 02.00.10)

Ковалішин Василь Володимирович
(к.х.н., 02.00.10)

Рогальський Сергій Петрович
(к.х.н., 02.00.06)

Семенюта Іван Володимирович
(к.б.н., 02.00.10)

Труш Марія Миколаївна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бондаренко О.М.

Телефон

+38 (044) 573-27-01

Реєстратор

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

