

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0214U006949

Державний реєстраційний номер: 0113U006029

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-04-2014

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Побудова гомологічної моделі мікобактеріальної проліл-тРНК синтетази та віртуальний скринінг колекції сполук. Відбір сполук та біохімічне тестування їхньої інгібувальної активності на лейцил-тРНК синтетазі *M. tuberculosis*.

Початок етапу: 08.2013

Закінчення етапу: 10.2013

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): Державне агентство з питань електронного урядування України

Код за ЄДРПОУ: 37471818

Місцезнаходження: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 2071730

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: 2.3 - виконання робіт за державними цільовими програмами

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2209070

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 390
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробка методологій мішень-направленого, раціонального пошуку нових протитуберкульозних препаратів

Назва роботи англійською:

Development of target based methodology of rational search for new antituberculous medicinal preparation.

Реферат українською:

Побудовано гомологічну модель просторової структури проліл-тРНК синтетази *M. tuberculosis*, яка була використана для докінгу колекції сполук. Оптимізовано методику рецепторно-орієнтованого віртуального скринінгу колекції сполук для проліл-тРНК синтетази *M. tuberculosis*. Проведено молекулярний докінг та одержано результати для 100000 органічних сполук. Виділено та очищено до чистоти >95% лейцил-тРНК синтетазу *M. tuberculosis* в кількості 50 мг. Розроблено протоколи біохімічного тестування та проведено тестування інгібувальної дії 408, відібраних в результаті рецепторно-орієнтованого віртуального скринінгу, сполук на активність ЛейРСМт у реакціях аміноацилювання тРНК та пірофосфатного обміну при концентраціях речовин 1 мМ та 100 мкМ. Для подальших досліджень відібрано 15 найбільш перспективних речовин. Для 6 сполук встановлено концентрації інгібіторів, при яких активність фермента пригнічується на 50% (IC₅₀) у реакціях аміноацилювання та пірофосфатного обміну. Найкращі значення IC₅₀ у реакції аміноацилювання становили 6, 7,2 та 7,6 мкМ, а в реакції пірофосфатного обміну – 1,9, 11,4 та 12,8 мкМ.

Реферат англійською:

The homology model of three-dimensional structure of prolyl-tRNA synthetase (ProRS) *M. tuberculosis* has been built. The method of receptor-oriented virtual screening has been proposed and docking collection of the library comprising 100,000 compounds into active site of ProRS *M. tuberculosis* were performed. Recombinant LeuRS *M. tuberculosis* has been obtained in amount of 50 mg and purified to >95%. The protocols of biochemical testing of inhibitory activity for chemical compounds toward LeuRS *M. tuberculosis* have been proposed and 408 compounds, selected during receptor-oriented virtual screening, have been tested under 1 mM and 100 μ M compound concentrations. Based on the residual activity of enzyme for further investigations we have selected 15 the most promising compounds. The IC₅₀ values were calculated for 6 inhibitors in both aminoacylation and ATP-pyrophosphate exchange reactions. The best values of IC₅₀ were 6, 7.2 and 7.6 μ M in aminoacylation reaction, and 1.9, 11.4 and 12.8 μ M in ATP-pyrophosphate exchange reaction.

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: Розробка методологій мішень-направленого, раціонального пошуку нових протитуберкульозних препаратів

Назва НТП англійською: Development of target based methodology of rational search for new antituberculous medicinal preparation.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Методика рецепторно-орієнтованого віртуального скринінгу колекції сполук для проліл-ТРНК синтетази *M. tuberculosis*. Методика біохімічного дослідження ефективності дії хімічних сполук на активність ЛейРС *M. tuberculosis*. Низькомолекулярні інгібітори ЛейРС *M. tuberculosis*.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: медичні установи, науковці

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

Грищенко Андрій Анатолійович

Гудзера Ольга Йосипівна

Крикливий Іван Андрійович

Коваленко Оксана Петрівна

Лукашов Сергій Степанович

Остринська Ольга Василівна

Яремчук Ганна Дмитрівна

Ярмолюк Сергій Миколайович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

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

