

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U104305

Державний реєстраційний номер: 0120U103862

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 16-12-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка in silico моделей та проведення розрахункових докінг досліджень для раціонального дизайну нових перспективних інгібіторів *Acinetobacter baumannii*

Початок етапу: 09.2020

Закінчення етапу: 12.2020

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: 380445599800, 380445585388

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.): 104
--

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 multi-drug resistant *Acinetobacter baumannii* clinical isolate: *in silico* and *in vitro* studies

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – QSAR моделі антибактеріальної активності, ферменти біосинтезу бактеріальних аміно- та жирних кислот, метаболізму кофакторів та вітамінів. Предмет дослідження – набір даних, молекулярні дескриптори, асоціативні нейронні мережі, методи машинного навчання: k-найближчих сусідів, XGBoost та WEKA-RF, нейронна та трансформаційна мережі графів, енциклопедія метаболічних шляхів KEGG PATHWAY *Acinetobacter baumannii*. Мета роботи – Розробка *in silico* моделей та проведення розрахункових докінг досліджень для раціонального дизайну нових перспективних інгібіторів *Acinetobacter baumannii*. За допомогою ряду методів машинного навчання та широкого спектру молекулярних дескрипторів, розрахованих за використання Веб-платформа OCHEM побудовано ряд QSAR моделей для передбачення біологічної активності довголанцюгових онієвих солей як інгібіторів *Acinetobacter baumannii*, які продемонстрували високу стабільність, надійність та прогностичну здатність. Еноїл-АСР-редуктаза, як ключовий фермент біосинтезу бактеріальних жирних кислот ідентифіковано як перспективну мішень для пошуку та створення нових антимікробних препаратів із антибактеріальним типом дії, в тому числі проти резистентних штамів *Acinetobacter baumannii*.

Реферат англійською:

The objects of study are QSAR models of antibacterial activity, analysis of bacterial amino and fatty acid biosynthesis enzymes, cofactors and vitamins metabolism. The subjects of the study are data sets, molecular descriptors, associative neural networks, machine learning methods (kNNs, XGBoost and WEKA-RF), neural and transformational graph networks, web resource KEGG PATHWAY *Acinetobacter baumannii*. A number of stable, highly predictive QSAR models have been created to predict the biological activity of long-chain onium salts as inhibitors of *Acinetobacter baumannii* using a number of learning methods (kNNs, XGBoost and WEKA-RF) and a wide range of molecular descriptors based on the OCHEM web resource. Enoyl-ACP reductase, as a key enzyme of bacterial fatty acid biosynthesis, has been identified as a promising target for the search and creation of new antimicrobials with an antibacterial type of action, including against resistant strains of *Acinetobacter baumannii*.

Індекс УДК: 577.2

Коди тематичних рубрик: 34.15

Керівники роботи

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

Науковий ступінь: к.б.н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Нові QSAR моделі антибактеріальної активності довголанцюгових онієвих солей із специфічним молекулярним механізмом дії проти Еноїл-АСР-редуктази *Acinetobacter baumannii*.

Назва НТП англійською: Novel QSAR models of the long-chain onium salts antibacterial activity with a specific molecular mechanism of action against Enoyl-ACP reductase *Acinetobacter baumannii*.

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: Сформована вибірка експериментальних даних, використання сучасних методів машинного навчання та широкого спектру молекулярних дескрипторів дозволили створити 4 регресійні та 1 консенсусну QSAR моделі з високими статистичними коефіцієнтами прогностичної здатності, що свідчить про їх стабільність і збалансованість, а також успішність для передбачення антибактеріальної активності нових сполук класу довголанцюгових онієвих солей як інгібіторів *Acinetobacter baumannii*. Ідентифікований у процесі роботи фермент еноїл-АСР-редуктазу, що вважається ключовим у біосинтезі бактеріальних жирних кислот представлено як найбільш перспективна молекулярна мішень для імідазол-та піридино-вісмісних довголанцюгових онієвих солей із анти-*Acinetobacter* типом активності.

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:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Виші та науково-виробничі лабораторії, що працюють в області нових біотехнологій розробки синтетичних низькомолекулярних біорегуляторів антибактеріального типу дії.

Перспективні ринки: Україна

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:

ІХ. Бібліографічний опис

1. Trush M. M., Kovalishyn V., Hodyna D. et al. In silico and in vitro studies of a number PILs as new antibacterials against MDR clinical isolate *Acinetobacter baumannii*. *Chemical Biology & Drug Design*. 2020. Vol. 95. P. 624–630.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Бовк 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**

