



## Výstupy a prínosy projektu za rok 2009

Číslo projektu: 0117-06	Termín riešenia: od 02/07 do 12/09
Zodp. riešiteľ: Mgr. Juraj Kóňa, Ph.D.	
Riešiteľská organizácia: Chemický ústav SAV Bratislava	
Spoluriešiteľské organizácie:	
Názov projektu: Počítačové modelovanie, syntéza a biologické testovanie selektívnych inhibítorov Golgi manozidázy II	

I. kategória		
Publikácie a citácie	Počet	
	zahraničné	v SR
<b>1. Publikácie a citácie SCI v karentovaných časopisoch</b>		
1.1 počet publikácií	1	
1.2 počet citácií podľa SCI na publikácie v rámci projektu (bez autocitácií)		
<b>2. Ostatné</b>		
2.1 počet vedeckých prác publikovaných v recenzovaných vedeckých časopisoch		
2.2 počet vedeckých prác publikovaných v nerecenzovaných odborných časopisoch a zborníkoch		
2.3 počet vedeckých monografií (rozsah publikácie min. 3 autorské hárky)		
2.4 počet odborných knižných publikácií		

**Zoznam publikácií a citácií podľa kategórií 1.1 – 1.2 a 2.1 – 2.4:****Poznámka:**

- v prípade základného výskumu je možné použiť len nasledovné ukazovatele: konkrétne publikácie v karentovaných časopisoch, ktoré už boli publikované (s úplnou identifikáciou v zmysle príslušnej normy, t.j. názov článku, názov periodika, dátum publikovania, autor, spoluautori, rozsah v autorských hárkoch) alebo boli zadané do tlače (dokumentovať kópiou oznamu/listu z príslušného periodika); citácie SCI na tieto publikácie (dokumentovať konkrétnymi údajmi)

↓↓

Výsledky projektu vzniknuté v priebehu rokov 2007-2009 boli spracované do nasledovných publikácií (1 v tlači, 2 poslané editorovi, 2 rozpracované):

J. Kóňa, I. Tvaroška "Comparative DFT study on the alpha-glycosidic bond in reactive species of galactosyl diphosphates", *Chem. Papers*, **2009**, 63, 598-607. (priložený reprint)

P. Both, L. Sobczak, C. Breton, S. Hann, K. Nöbauer, K. Paschinger, I. B.H. Wilson, J. Mucha "Distantly-related plant and nematode core  $\alpha$ 1,3-fucosyltransferases display similar trends in structure-function relationships", *Glycobiology*, poslané editorovi (priložený manuskript a oznam o zaslaní)



S. T. Ali, S. Jahangir, S. Karamat, W. M. F. Fabian, K. Nawara, J. Kóňa "Theoretical Study on the Redox Cycle of Bovine Glutathione Peroxidase GPx1: pKa Calculations, Docking and Molecular Dynamics Simulations", *J. Chem. Theory Comput.*, poslané editorovi (priložený manuskript a oznam o zaslaní)

J. Kóňa, I. Tvaroška, A. Nawara, S. Kozmon, I. Tomčová, J. Mucha, P. Both, "Theoretical study on Golgi and lysosomal alpha-mannosidases II: Insights from homology modeling, docking and pK<sub>a</sub> calculations", *Proteins*, rozpracované

I.B. Wilson, I. Tomčová, S. Šesták, J. Kóňa, I.Tvaroška, J. Mucha, "Cloning , expression and characterisation of four different lysosomal mannosidases from *D. melanogaster*", *Glycobiology*, rozpracované

U. Das, M. A. A. Mezianne, D. A. Kuntz, H. Strachan, J. Glushka, J. Kóňa, I. Tvaroška, D. R. Rose, K. Moremen, A. Siriwardena, "Rapid Synthesis of a Dihydroxylated Pyrrolopyrimidinone that Inhibits the Human Golgi alpha-Mannosidase II but not its glycosyl hydrolase Family 38 paralog, the broad-specificity Lysosomal alpha-Mannosidase", *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, rozpracované



<b>II. kategória</b>	
<b>Patenty, vynálezy a úžitkové vzory</b>	<b>Počet</b>
<b>1. Patentové prihlášky</b>	
1.1 patentová prihláška v SR	
1.2 samostatná patentová prihláška do zahraničia	
1.3 európska patentová prihláška	
1.3.1 (počet určených krajín kde je patent chránený)	
1.4 medzinárodná prihláška patentov v PCT	
1.4.1 (počet určených krajín kde je patent chránený)	
<b>2. Plánované patentové prihlášky</b>	
2.1 patentová prihláška v SR	
2.2 samostatná patentová prihláška do zahraničia	
2.3 európska patentová prihláška	
2.3.1 (počet krajín kde je patent chránený )	
2.4 medzinárodná prihláška patentov v PCT	
2.4.1 (počet krajín kde je patent chránený )	
<b>3. Udelené patenty</b>	
3.1 patent v SR	
3.2 patent v zahraničí	
3.3 európsky patent	
3.3.1 (počet určených krajín kde je patent chránený)	
<b>4. Realizované patenty</b>	
4.1 v SR	
4.2 v zahraničí	
<b>5. Vynálezy, úžitkové vzory</b>	
5.1 v SR	
5.2 v zahraničí	

*PCT – skratka Zmluvy o patentovej spolupráci (Patent Cooperation Treaty) prostredníctvom ktorého môže prihlasovateľ žiadať o ochranu v zahraničí. PCT spravuje Svetová organizácia duševného vlastníctva so sídlom v Ženeve.*

### **Zoznam (špecifikácia) patentov:**

#### **Poznámka:**

- v prípade aplikovaného výskumu a vývoja je možné použiť nasledovné ukazovatele: patentová štatistika - pôvodca, prihlasovateľ, číslo patentu, resp. patentovej prihlášky; v členení patentová prihláška, udelené patenty a realizované patenty

↓↓



<b>III. kategória</b>	
<b><i>Aplikované výsledky</i></b>	<b>Počet</b>
<b>model</b>	
<b>prototyp</b>	
<b>nový výrobok</b>	
<b>poloprevádzková linka</b>	
<b>overená technológia</b>	
<b>nová odroda</b>	
<b>softvérový produkt</b>	
<b>výsledky premietnuté do právnych predpisov a noriem</b>	
<b>ostatné výsledky aplikovaného výskumu</b>	

**Zoznam (špecifikácia) aplikovaných výsledkov:**

**Poznámka:**

- okrem identifikačných údajov, ako sú lokalizácia výsledku; technické parametre výsledku; ekonomické parametre výsledku vyjadrené v €; názov vlastníka výsledku - uviesť aj stručný slovný popis výstupu a súčasne aj spôsob realizácie

↓↓



## Ukazovatele aplikačných výstupov projektov VaV

Pozn: Vyplní sa pri ukončených projektoch aplikovaného výskumu a vývoja!

Ukazovatele aplikačných výstupov projektov výskumu a vývoja – <u>za celý projekt</u> (súčet výstupov čiastkových projektov)				
Realizátor, resp. užívateľ:				
Začiatok realizácie:				
Sledované ukazovatele a ich účinky za celý objem	0. rok (posledný rok riešenia)	1. rok po ukončení riešenia	2. rok po ukončení riešenia	3. rok po ukončení riešenia
1. Výnosy spolu (v €)				
2. Hospodársky výsledok pred zdanením (v €)				
3. Pridaná hodnota (v €)				
4. Vytvorenie nových pracovných miest				
5. Zvýšenie vývozu (v €)				
6. Rentabilita výnosov (%)				
7. Produktivita práce z pridanej hodnoty (v €)				
8. Podiel vývozu na celkovom odbyte (%)				
9. Iné (podľa uváženia)				

**Verbálny popis hmotných účinkov, ktoré sa nedajú presne vyčíslit':**

Maximálny rozsah 300 slov netechnickým (laickým) spôsobom.

**Poznámka:**

- ukazovatele aplikačných výstupov (nový výrobok; nová technológia; novovytvorené pracovné miesta; v prípade poľnohospodárskeho výskumu nové plemeno, resp. nová odroda a pod. – v prípade, že sa použijú ako ukazovatele aplikačné výstupy, je potrebné uviesť aj odberateľa (užívateľa) výstupov, ktorý naozaj v skutočnosti uvedené výstupy realizuje – t.j. nie plánovaného odberateľa, ale skutočného)

↓↓

<b>IV. kategória</b>	
<b>Výstupy do vzdelávania a popularizácie vedy</b>	<b>Počet</b>
<b>Počet účastníkov formálneho alebo neformálneho vzdelávania</b>	
<b>Počet pripravených vzdelávacích kurzov</b>	
<b>Počet diplomantov, ktorých diplomové práce súviseli s riešeným projektom</b>	
<b>Počet PhD študentov, ktorých témy doktorandských prác súviseli s riešeným projektom</b>	<b>1</b>
<b>Popularizačné aktivity</b>	

**Zoznam (špecifikácia) výstupov:**
**Poznámka:**

- Pri diplomantoch uviesť meno študenta, tému diplomovej práce, časové rámce a vedúceho diplomovej práce.
- Pri PdD študentoch uviesť meno PhD študenta, tému doktorandskej práce, časové rámce a školiteľa, uveďte či PhD študent bude priamo členom riešiteľského kolektívu alebo nie.
- Popularizačné aktivity - články v novinách, časopisoch, špecifické publikácie, relácie v elektronických médiách, súťaže, festivaly, partnerstvá s regionálnymi školami atď.

↓

V rámci projektu bol v roku 2009 školený 1 PhD študent, ktorý bol spoluriešiteľom projektu:

Mgr. Agáta Nawara

(300 hod/ročne, školiteľ: Ing. Igor Tvaroška, DrSc., téma: Štrukturálny dizajn analógov tranzitného stavu alfa-manozidáz)

↓

<b>V. kategória</b>	
<b>Ostatné výsledky</b>	<b>Počet</b>
<b>Oponovaná výskumná správa určená pre štátnu správu</b>	
<b>Audiovizuálna tvorba</b>	
<b>Elektronické dokumenty, t.j. dokumenty vydané len vo forme čitateľnej prostredníctvom počítača, internetu a pod.</b>	<b>1</b>
<b>Usporiadanie/zorganizovanie konferencie</b>	
<b>Usporiadanie/zorganizovanie výstavy</b>	
<b>Ostatné výsledky</b>	<b>3</b>

**Zoznam (špecifikácia) výsledkov:**
**Poznámka:**

- Ostatné výsledky - koncepcie, metodiky, štúdie a pod., ktoré riešiteľ v podobe zmluvného zabezpečenia, alebo inej formy záväzku odovzdáva realizátorovi pre konkrétne aplikácie a využitie v hospodárskej a spoločenskej praxi, buď s okamžitým využitím alebo s perspektívou využitia v budúcich obdobiach

↓↓

Elektronické dokumenty:

 Webová stránka (<http://www.modlab.chem.sk/apvv/>) prezentujúca detaily a progres APVV projektu

Prezentácia výsledkov projektu vo forme posterov na troch vedeckých podujatiach:

J. Kóňa, A. Nawara, I. Tomčova, J. Mucha, I. Tvaroška, "Homology modeling in prediction of 3-D structures of lysosomal and Golgi alpha-mannosidase II" Poster PB48, Eurocarb15 (15th European Carbohydrate Symposium), Viedeň, Rakúsko, 19.7.-24.7.2009 (priložený abstrakt)

I. B. H. Wilson, I. Tomčova, S. Šesták, J. Kóňa, J. Mucha, "Characterisation of three recombinant Drosophila melanogaster lysosomal alpha-mannosidase homologues" Poster PC22, Eurocarb15 (15th European Carbohydrate Symposium), Viedeň, Rakúsko, 19.7.-24.7.2009 (priložený abstrakt)

J. Kóňa, I. Tvaroška, "Comparative DFT study on the alpha-glycosidic bond in reactive species of sugar diphosphates" Poster A.63, 13th ICQC (International Congress on Quantum Chemistry), Helsinki, Fínsko, 21.6.-28.6.2009 (priložený abstrakt)



<b>VI. kategória</b>	
<b>Pridaná hodnota riešeného projektu výskumu a vývoja</b>	<b>Počet</b>
<b>Novovytvorené pracovné miesta</b>	
<b>Počet post-doktorandských miest, ktoré sa vytvorili v rámci riešenia projektu</b>	
<b>Vedecké monografie (rozsah publikácie min. 2 autorské hárky); odborné knižné publikácie</b>	
<b>Vytvorené partnerstvo medzi akademickým sektorom a podnikateľským sektorom</b>	
<b>Založenie nového podnikateľského subjektu za účasti vedeckých pracovníkov</b>	
<b>Vyvolané projekty výskumu a vývoja, ktoré priamo nadväzujú na riešený projekt a boli predložené v rámci SR do APVV, VEGA a pod.</b>	<b>1</b>
<b>Vyvolané projekty výskumu a vývoja, ktoré priamo súvisia s riešeným projektom a boli predložené do medzinárodnej súťaže</b>	

### **Zoznam (špecifikácia) výsledkov:**

#### **Poznámka:**

- novovytvorené pracovné miesta (uviesť počet, existencia pracovného miesta – od – do, názov zamestnávateľa a jeho organizačná zložka),
- počet post-doktorandských miest, ktoré sa vytvorili v rámci riešenia projektu (uviesť meno, hlavnú pracovnú náplň, dátum zamestnania – od - do, názov zamestnávateľa),
- vedecké monografie (rozsah publikácie min. 2 autorské hárky); odborné knižné publikácie,
- vytvorené partnerstvo medzi akademickým sektorom (organizačná zložka SAV a vysokej školy) a podnikateľským sektorom (stručný popis formy spolupráce – napr. spoločné výskumné pracovisko; zmeny v študijných odboroch; mobility pracovných síl a pod.),
- založenie nového podnikateľského subjektu za účasti vedeckých pracovníkov (spin-off, start-up efekty),
- vyvolané projekty výskumu a vývoja, ktoré priamo nadväzujú na riešený projekt a boli predložené v rámci SR do APVV, VEGA a pod.,
- vyvolané projekty výskumu a vývoja, ktoré priamo súvisia s riešeným projektom a boli predložené do medzinárodnej súťaže – rámcové programy EÚ pre výskum a vývoj, European Science Foundation, Eureka, COST a pod.,
- uviesť ďalšie konkrétne formy medzinárodnej spolupráce v rámci riešenia projektu,
- stručný popis spôsobu zabezpečenia publicity/popularizácie výsledkov riešeného projektu, prípadne aké popularizačné aktivity sú naplánované, uviesť prípadnú internetovú stránku projektu, ak bude vytvorená (rozsah maximálne 100 slov),
- iné údaje dokumentujúce pridanú hodnotu projektu.

↓↓

#### Vyvolané projekty výskumu a vývoja nadväzujúce na riešenie APVV projektu:

projekt VEGA-2-0176-09 (2009-2011)

Štruktúrny dizajn, syntéza a biochemické testovanie indolizidínových zlúčenín s antirakovinotvornými účinkami

Zodpovedný riešiteľ: Mgr. Juraj Kóňa, PhD., Chemický ústav SAV Bratislava

Medzinárodná spolupráca v rámci APVV projektu s pracovnou skupinou organických chemikov Dr. A. Siriwardenu z Univerzity Julesa Verna (Fakulta vied, Laboratórium sacharidov) v Amiens vo Francúzsku. Syntéza pyrrolo[1,2-a]pyrimidín-6(7H)-ónov-manozidázových inhibítorov v laboratóriu v Amiens pre riešiteľov APVV projektu.





Institucionálna spolupráca v rámci APVV projektu s pracovnou skupinou organických chemikov Dr. Š. Marchalína zo Slovenskej Technickej Univerzity v Bratislave (Chemickotechnologická fakulta, Katedra organickej chémie). Syntéza indolizidínových zlúčenín (navrhnutých počítačovým modelovaním ako selektívnych inhibítorov manozidáz) pre riešiteľov APVV projektu.

Institucionálna spolupráca v rámci APVV projektu s pracovnou skupinou organických chemikov Dr. Polákovej z Oddelenia glykochémie z Chemického ústavu z Centra glykomiky zo Slovenskej Akadémie Vied. Syntéza manózových derivátov zlúčenín (navrhnutých počítačovým modelovaním ako selektívnych inhibítorov manozidáz) pre riešiteľov APVV projektu.