

Реєстраційна картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0121U110903

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-05-2021

II. Підстава для проведення робіт

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

У тому числі по роках:	
2021	70.000 тис. грн.
2022	100.000 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 170.000 тис. грн.	

III. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

IV. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут молекулярної біології і генетики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження: вул. Академіка Заболотного, буд. 150, м. Київ, 03143, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442000356, 380445261169

V. Відомості про співвиконавця ДіР

VI. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Комп'ютерне моделювання терапевтичних білків та їх наноккомпозитних комплексів з використанням ґрид-технологій та штучного інтелекту

Назва роботи англійською:

Computer modeling of therapeutic proteins and their nanocomposite complexes with using grid technologies and artificial intelligence

Мета роботи українською:

Метою проекту є проведення комп'ютерного моделювання структури і молекулярної динаміки терапевтичних білків та їх наноккомпозитних комплексів з використанням ґрид-технологій та штучного інтелекту. У відділі білкової інженерії і біоінформатики ІМБІГ проводяться дослідження протипухлинних білків EMAR II, С-модуля тирозил-тРНК синтетази та білка AIMP/p43 та їх наноккомпозитних комплексів. Слід зазначити, що ці білки належать до внутрішньо неструктурованих білків, які недоступні для дослідження методом рентгеноструктурного аналізу кристалів. Єдиною можливістю дослідження таких комплексів є комп'ютерне моделювання їх просторової структури та внутрішньомолекулярної динаміки, яка детермінує їх функцію.

Мета роботи англійською:

The aim of the project is to conduct computer modeling of the structure and molecular dynamics of therapeutic proteins and their nanocomposite complexes using grid technologies and artificial intelligence. The Department of Protein Engineering and Bioinformatics of IMBIG conducts research on antitumor proteins EMAR II, C-module of tyrosyl-tRNA synthetase and AIMP / p43 protein and their nanocomposite complexes. It should be noted that these proteins belong to the internal unstructured proteins, which are not available for study by X-ray diffraction analysis of crystals. The only possibility to study such complexes is computer modeling of their spatial structure and intramolecular dynamics, which determines their function.

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найважливіших проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 – фундаментальна

Очікувані результати: Технології

Галузь застосування: Структура наноккомпозитних комплексів цитокінів ЕМАР II, АІМР/р43, С-модуля тирозил-тРНК синтетази, їх стабільність та динаміка. Створення патентів на основі отриманих результатів.

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Корнелюк Олександр Іванович

Науковий ступінь: д.б.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Комп'ютерне моделювання структури комплексів ЕМАР II, АІМР/р43 та С-TyrRS з циклодекстринами та декстраном-70. Програмно-апаратна модернізація кластера Інституту молекулярної біології і генетики НАН України.

Початок етапу: 05.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 2

Назва етапу: Комп'ютерне моделювання наноккомпозитних комплексів ЕМАР II, С-TyrRS та АІМР/р43 з наночастинками TiO₂. Аналіз динаміки неструктурованих ділянок білків, формування метастабільних структурних елементів та пошук енергетично вигідних конформацій білків та їх комплексів методом штучного інтелекту. Інсталяція операційної системи та модернізація програмного коду для аналізу енергії зв'язування в траєкторіях молекулярної динаміки.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 3

Назва етапу: ослідування динамічних аспектів функціонування терапевтичних білків та їх наноккомпозитних комплексів, характеристика локальних конформаційних змін і формування стабільних енергетично вигідних конформацій в процесі їх динаміки. Інтеграція технології Singularity для локального використання на кластері та в грід і в хмарі.

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 004.8, 577.29:615, 519.711.3

Коди тематичних рубрик: 28.23.01, 34.15.63, 28.17.19

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Тукало Михайло Арсентійович

д. б. н., 03.00.03

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Коломієць Л.А.

Телефон

+38 (044) 526-55-89

Реєстратор

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

Юрченко Т.А.

