

Реєстраційна картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний реєстраційний номер: 0117U000204

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2017



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:	
2017	2000.000 тис. грн.
2018	2000.000 тис. грн.
2019	2000.000 тис. грн.
2020	2000.000 тис. грн.
2021	2000.000 тис. грн.
Загальний обсяг фінансування: 10000.000 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:

Нові підходи до мішень-спрямованого пошуку потенційних протипухлинних та протиінфекційних засобів для подолання проблеми резистентності до ліків

Назва роботи англійською:

New approaches to target-directed search for the potential antitumor and anti-infective agents to overcome the problem of drug resistance

Мета роботи українською:

Мета роботи - розробка новітніх підходів до пошуку потенційних протипухлинних, протимікробних і противірусних засобів. Комплексний мішень-орієнтований пошук буде спрямовано на ряд специфічних біологічних мішеней, у т.ч. ферменти лейцил- і метіоніл-ТРНК-синтетази *M.tuberculosis*, еукаріотичну та бактеріальну топоізомеразу I, протеїнкіназу FGFR1 та контрольні елементи геному вірусу B1L-1.

Мета роботи англійською:

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: Методи, теорії

Галузь застосування: Медицина, біотехнологія, медична хімія, молекулярна біологія

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Дубей Ігор Ярославович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VII. Етапи виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Побудова гомологічних моделей МетРС і ЛейРС *M.tuberculosis*, дослідження сайтів зв'язування аміноацил-аденілатів. Створення генноінженерної конструкції для одержання рекомбінантних МетРС і ЛейРС *M.tuberculosis*. Дизайн структур потенційних інгібіторів ТопоІ, розробка методів отримання та синтез сполук. Оптимізація методики комп'ютерного пошуку інгібіторів FGFR1 та проведення рецепторно-орієнтованого віртуального скринінгу сполук з метою відбору сполук для тестування *in vitro*. Вдосконалення й розширення функціональності програмного забезпечення бази даних CESSHIV-1.

Початок етапу: 01.2017

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 2

Назва етапу: Побудова моделей МетРС і ЛейРС людини. Порівняння сайтів зв'язування ензимів *M. tuberculosis* і людини для пошуку відмінностей, важливих для розробки інгібіторів, селективних до патогенів. Створення генноінженерних конструкцій для одержання рекомбінантних МетРС і ЛейРС людини. Дослідження інгібувальної дії сполук щодо еукаріотичної та бактеріальної ТопоІ в системі релаксації ДНК *in vitro*. Отримання рекомбінантного аналога FGFR1 людини. Проведення біохімічного тестування активності інгібіторів FGFR1 *in vitro*. Дослідження різних схем експонування сигналу PAS в домені PBS геномних РНК ВІЛ-1 різних груп і підтипів і геномних РНК вірусу ВІМ, створення відповідних розділів бази даних.

Початок етапу: 01.2018

Закінчення етапу: 12.2018

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 3

Назва етапу: Експресія й очищення ЛейРС і МетРС *M. tuberculosis*. Докінг колекції сполук у сайти зв'язування обраних мішеней, відбір перспективних сполук та тестування їхньої інгібувальної активності на рекомбінантних ензимах *in vitro*. Синтез та дослідження інгібіторів ТопоІ в системі релаксації ДНК *in vitro*. Аналіз антипроліферативної дії інгібіторів ТопоІ у культурах пухлинних клітин. Моделювання взаємодії інгібіторів з ДНК-топоізомеразним комплексом квантово-хімічними методами Біохімічне тестування інгібіторів FGFR1 *in vitro*. Дослідження залежності активності інгібіторів від структури та розробка моделі зв'язування інгібіторів з активним сайтом FGFR1. Дослідження різних моделей структури, що охоплює субдомен PBS і шпильки DIS, SD і Psi, в геномних РНК ВІЛ-1 різних груп і підтипів і геномних РНК вірусу ВІМ та створення відповідних розділів бази даних.

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 4

Назва етапу: Побудова фармакофорних моделей МетРС та ЛейРС M.tuberculosis, фармакофорний скринінг і відбір лігандів, тестування їхньої інгібувальної активності in vitro на рекомбінантних ензимах. Аналіз залежності "структура-активність" інгібіторів ТопоІ та FGFR1. Розробка моделі зв'язування інгібіторів з активним сайтом FGFR1. Структурна оптимізація знайдених у процесі скринінгу інгібіторів ТопоІ та FGFR1. Вивчення інгібувальної дії нових сполук щодо еукаріотичної та бактеріальної ТопоІ. Дослідження взаємодії інгібіторів з ДНК й топоізомеразним біофізичними методами. Оцінка протимікробної дії інгібіторів у бактеріальних культурах. Дослідження структури області, яка контролює програмований зсув рамки зчитування при трансляції гену gag, в геномних РНК ВІЛ-1 різних груп і підтипів і геномних РНК вірусу ВІМ та створення відповідних розділів бази даних.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

Номер етапу: 5

Назва етапу: Визначення особливостей взаємодії інгібіторів АРСаз із ензимами з використанням докінгу, молекулярної динаміки та метадинаміки. Біохімічне тестування інгібіторів АРСаз, ТопоІ та FGFR1 in vitro, структурна оптимізація інгібіторів на основі моделей зв'язування, критеріїв подібності до лікарських засобів та даних біологічного тестування. Дослідження антипроліферативної дії активних інгібіторів FGFR1 на пухлинних клітинних лініях. Оцінка цитотоксичності інгібіторів ТопоІ та FGFR1. Дослідження структури області, що містить 3'-сайт сплайсингу А7 і елементи, що регулюють його функціонування, в геномних РНК ВІЛ-1 різних груп і підтипів і геномних РНК вірусу ВІМ та створення відповідних розділів бази даних. Узагальнення результатів досліджень.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

VIII. Індекс УДК, тематичні рубрики НТІ

Індекс УДК: 577.21, 577.1+577.2+615.2

Коди тематичних рубрик: 34.15.25

IX. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Тукало Михайло Арсентійович
д. б. н., 03.00.03

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Санченко О.М.

Телефон

+38 (044) 200-03-26

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.