

Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0121U110837

Відкрита

Дата реєстрації: 28-04-2021

Статус виконавця: 17 - головний виконавець



1. Загальні відомості

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 1550.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2021	250.000
2022	300.000
2023	300.000
2024	350.000
2025	350.000

2. Замовник

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Підпорядкованість: Президія Національної академії наук України

Телефон: 380442350981

Телефон: 380442262341

Телефон: www.nas.gov.ua

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: <http://nas.gov.ua>

3. Виконавець

Назва організації: Державна установа "Інститут харчової біотехнології та геноміки Національної академії наук України"

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02128514

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Осиповського, буд. 2-а, м. Київ, Київська обл., 04123, Україна

Телефон: 380444343777

E-mail: office.ifbg@nas.gov.ua

WWW: <http://ifbg.org.ua>

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Інтеграція Grid-системи та Cloud-технологій для вирішення задач з пошуку нових гетероциклічних сполук бензопірано-/бензамідної природи як ефективних сполук з антимікротрубочковою активністю

Назва роботи (англ)

Integration of Grid-system and Cloud-technologies for solving problems on search of new heterocyclic compounds of benzopyrano- / benzamide nature as effective compounds with antimicrotubule activity

Мета роботи (укр)

Залучення Грід і хмарних обчислень для масштабного пошуку біологічно-активних сполук протипухлинної дії, активність яких безпосередньо пов'язана з молекулярними мішенями тубулінового цитоскелету.

Мета роботи (англ)

Involvement of Grid and cloud computing for a large-scale search for biologically active compounds of antitumor action, the activity of which is directly related to the molecular targets of the tubulin cytoskeleton.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: 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: новітні біотехнології

Експерти

Загородній Анатолій Глібович (д. ф.-м. н., професор, акад.)

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	04.2021	12.2021	Проміжний звіт	Адаптація існуючих розробок колективу для реалізації в Грід і залучення хмарних сервісів для високо-пропускнуго скринінгу гетероциклічних сполук бензопіранової, бензамідної та інших груп, з метою уточнення механізмів їх взаємодії з тубуліном людини
2	01.2022	12.2022	Проміжний звіт	Вивчення хімічного простору гетероциклічних сполук бензопіранової та бензамідної природи за допомогою методів біо- і хемоінформатики із залученням технологій високопродуктивних обчислень
3	01.2023	12.2023	Проміжний звіт	Розробка і адаптація алгоритмів обробки великих масивів низькомолекулярних сполук з метою дизайну комбінаторних бібліотек лігандів, що задовольняють умовам високо-пропускнуго скринінгу засобами Грід і хмари
4	01.2024	12.2024	Проміжний звіт	Хемоінформатичний дизайн найбільш перспективних фармакофорних моделей з метою ідентифікації хітів високо-пропускнуго віртуального скринінгу
5	01.2025	12.2025	Остаточний звіт	Створення обчислювальної платформи для пошуку і верифікації інгібіторів цільових білків шляхом віртуального скринінгу і моделювання поведінки ліганд-білкових комплексів методом молекулярної динаміки

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 50.39.31

Індекс УДК: 004.4; 004.4:004.7, 004.75:004.942

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Блюм Ярослав Борисович (д. б. н., професор, академік НАН України)

Керівники роботи:

Блюм Ярослав Борисович (д. б. н., професор, академік НАН України)

Відповідальний за подання документів: Калафат Л.О. (Тел.: +38 (050) 146-05-02)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.