

Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0121U110903

Відкрита

Дата реєстрації: 05-05-2021

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.): 170.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2021	70.000
2022	100.000

2. Замовник

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

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

Підпорядкованість:

Телефон: 380442343243

E-mail: prez@nas.gov.ua

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

3. Виконавець

Назва організації: Інститут молекулярної біології і генетики Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417101

Підпорядкованість: Національна академія наук України

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

Телефон: 380442000356

Телефон: 380445261169

E-mail: inform@imbg.org.ua

WWW: <http://www.imbg.org.ua>

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

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

Назва роботи (англ)

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

Мета роботи (укр)

Метою проекту є проведення комп'ютерного моделювання структури і молекулярної динаміки терапевтичних білків та їх наноконкомпозитних комплексів з використанням ґрид-технологій та штучного інтелекту. У відділі білкової інженерії і біоінформатики ІМБІГ проводяться дослідження протипухлинних білків EMAP II, С-модуля тирозил-тРНК синтетази та білка AIMP/p43 та їх наноконкомпозитних 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 (англ)

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 EMAP 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 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: Технології

Галузь застосування: Структура наноконкомпозитних комплексів цитокінів EMAP II, AIMP/p43, С-модуля тирозил-тРНК синтетази, їх стабільність та динаміка. Створення патентів на основі отриманих результатів.

Експерти

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	05.2021	12.2021	Проміжний звіт	Комп'ютерне моделювання структури комплексів ЕМАР II, АМР1/р43 та С-ТурRS з циклодекстринами та декстраном-70. Програмно-апаратна модернізація кластера Інституту молекулярної біології і генетики НАН України.
2	01.2022	12.2022	Проміжний звіт	Комп'ютерне моделювання нанокompatитних комплексів ЕМАР II, С-ТурRS та АМР1/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.
3	01.2023	12.2023	Остаточний звіт	ослідження динамічних аспектів функціонування терапевтичних білків та їх нанокompatитних 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 ґрид і в хмарі.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 28.23.01, 34.15.63, 28.17.19

Індекс УДК: 004.8, 577.29:615, 519.711.3

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Тукало Михайло Арсентійович (д. б. н., акад.)

Керівники роботи:

Корнелюк Олександр Іванович (д.б.н., професор)

Відповідальний за подання документів: Коломієць Л.А. (Тел.: +38 (044) 526-55-89)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.