

# Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0125U002229

Відкрита

Дата реєстрації: 17-04-2025

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:** 0111010

**Напрямок фінансування:** 2.7 - інше (Стипендіальна робота в рамках іменної стипендії Верховної Ради України для молодих учених - докторів наук (Постанова Верховної Ради України від 22.08.2024 № 3925-IX))

### Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 181.680

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2024	181.680

## 2. Замовник

**Назва організації:** Управління справами Апарату Верховної Ради України

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 20064120

**Адреса:** вул. Грушевського, буд. 5, м. Київ, 01008, Україна

**Підпорядкованість:** Верховна Рада України

**Телефон:** 380442552856

**Телефон:** 380442553166

**Телефон:** 380442552784

**WWW:** [http://w1.c1.rada.gov.ua/pls/site2/p\\_aparat](http://w1.c1.rada.gov.ua/pls/site2/p_aparat)

## 3. Виконавець

**Назва організації:** Крицишин-Дилевич Анна Петрівна

**Код ЄДРПОУ/ІПН:** 3076504368

**Підпорядкованість:**

**Адреса:** Рядова, 10, м. Львів, Львівська обл., 79070, Україна

**Телефон:** 380678885827

## 4. Співвиконавець

## 5. Науково-технічна робота

### Назва роботи (укр)

Молекулярний дизайн, синтез і біологічна активність малих гетероциклічних молекул на основі азолідинів із поліфармакологічним профілем

### Назва роботи (англ)

Molecular design, synthesis and biological activity of small heterocyclic molecules based on azolidines with a polypharmacological profile

### Мета роботи (укр)

Спрямований дизайн та синтез малих гетероциклічних молекул – похідних азолідинів як поліфармакологічних «лікоподібних молекул» на основі отриманих експериментальних даних *in vitro* та *in silico* досліджень, прогнозування та оцінка їх фармакологічної активності із застосуванням методів комп'ютерної хімії, *in silico* вивчення молекулярних механізмів реалізації протипухлинної, протипаразитарної та антибактеріальної активності

### Мета роботи (англ)

The directed design and synthesis of small heterocyclic molecules – azolidine derivatives as polypharmacological "drug-like molecules" based on the obtained experimental data of *in vitro* and *in silico* studies, prediction and evaluation of their pharmacological activity using computer chemistry methods, *in silico* study of molecular mechanisms of antitumor, antiparasitic and antibacterial activity

**Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності:** Науки про життя, нові технології профілактики та лікування найпоширеніших захворювань

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Вид роботи:** 39 - фундаментальна

**Очікувані результати:** Методи, теорії, Взаємозв'язок структура-активність для встановлення шляхів оптимізації нових синтетичних молекул

**Галузь застосування:** Розробка нових біологічно-активних молекул

## 6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	01.2024	06.2024	Проміжний звіт	Розробка фармакофорних моделей на основі структури активних сполук із використанням програмного забезпечення LigandScout 4.4. Проведення <i>in silico</i> досліджень (молекулярного докінгу) найактивніших молекул до есенціальних біо-мішеней збудників <i>Trypanosoma brucei</i> , <i>Leishmania major</i> , <i>Staphylococcus aureus</i> , <i>Candida albicans</i> .
2	07.2024	12.2024	Проміжний звіт	Встановлення взаємозв'язків структура-активність досліджуваних молекул, а також поліфармакологічного профілю (протиракова та/або протипаразитарна чи протимікробна дія) виділених найактивніших сполук.
3	01.2025	06.2025	Остаточний звіт	Оформлення результатів проведеної науково-дослідної роботи, написання та подання до друку наукових публікацій.

## 7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21.27, 31.27.22, 76.31

Індекс УДК: 547.7/.8, 615.281:577.1, 615.03; 615.1/.3

## 8. Заключні відомості

**Керівник організації:**

Чемерис Орест Мирославович (д. мед. н., професор)

**Керівники роботи:**

Крицишин-Дилевич Анна Петрівна (д. фармац. н., професор)

**Відповідальний за подання документів:** Крицишин-Дилевич Анна Петрівна (Тел.: +38 (067) 888-58-27)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності  
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.