Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0122U200284

Відкрита

Дата реєстрації: 16-06-2022

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: 2201380

Напрям фінансування: 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 120.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2022	120.000

2. Замовник

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: https://mon.gov.ua/ua

3. Виконавець

Назва організації: Інститут органічної хімії Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417325

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Мурманська, буд. 5, м. Київ, 02094, Україна

Телефон: 380445527150

Телефон: 380445510613

Телефон: 380445732643

E-mail: ioch@ioch.kiev.ua

WWW: http://ioch.kiev.ua

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Комп'ютерний дизайн селективних хімічних зондів для ангіотензин-перетворюючого ферменту 2

Назва роботи (англ)

Computer-aided design of selective chemical probes of angiotensin-converting enzyme 2

Мета роботи (укр)

Основна мета цього проекту - розробка селективних хімічних зондів для прямої ефективної модуляції каталітичної активності ACE2, як способу вивчення побічних ефектів, спричинених SARS-CoV-2. Буде створено кілька обчислювальних моделей для віртуального скринінгу, орієнтованого на ACE2, токсичності, селективності та прогнозування проникності ГЕБ. De novo дизайн керований штучним інтелектом буде використовуватися для створення нових потенційних інгібіторів ACE2. Для автоматичного опрацю-вання синтетичного шляху отримання нових сполук буде впроваджена нова версія процедури ретросинтетичного комбінаторного аналізу (RECAP). Для кожної молекули вона забезпечить набір комерційно доступних реагентів та реакцій (враховуючи ті, що нещодавно з'явилися), необхідних для її синтезу. Нарешті, попередньо обрані віртуальні сполуки будуть синтезовані та випробувані як інгібітори ферментів ACE2 та ACE для забезпечення селектив-ності розроблених ACE2 інгібіторів.

Мета роботи (англ)

The main goal of this project is to design selective chemical probes for direct efficient modulation of ACE2 catalytic activity as a way to study SARS-CoV-2-induced side effects. Several computational models for ACE2-targeted virtual screening, toxicity, selectivity and BBB permeability prediction will be created. Artificial intelligence-driven de novo design will be used to generate new potential inhibitors of ACE2. For the automatic elaboration of the synthetic procedure for obtaining these compounds, new version of the Retrosynthetic Combinatorial Analysis Procedure (RECAP) will be implemented. For each molecule it will provide a set of commercially available reagents and reactions (including recently appeared), that are needed for its synthesis. Finally, computationally preselect-ed compounds will be synthesized and tested in fluorometric assays against both enzymes ACE2 and ACE to ensure selectivity of designed ACE2 inhibitors.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 48 - прикладна

Очікувані результати: Матеріали, Методи, теорії

Галузь застосування: Біометичні дослідження, хімічна генетика

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	05.2022	12.2022	Остаточний звіт	De novo дизайн нового покоління потенційних інгібіторів ACE2, знайдених за допомогою штучного інтелекту. Розробка автоматизованої процедури ретросинтетичного аналізу для сполук, що були знайдені за допомогою штучного інтелекту. Синтез та біологічні випробування вибраних сполук, розроблених de novo. Остаточне оновлення обчислювальних моделей на основі нових експериментальних даних.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.21, 31.21.17

Індекс УДК: 547 , 547:544.424 , 547, 547:544.424 , 378.147

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Вовк Михайло Володимирович (д. х. н., член-кор.)

Керівники роботи:

Волочнюк Дмитро Михайлович (д.х.н., професор)

Відповідальний за подання документів: Волочнюк Дмитро Михайлович (д.х.н., професор) (Тел.: +38 (096) 713-94-94)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.