

Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0125U000355

Відкрита

Дата реєстрації: 17-01-2025

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: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 22762.298

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2025	3376.003
2026	3882.403
2027	4464.764
2028	5134.478
2029	5904.650

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 біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В. П. Кухаря Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03563790

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Академіка Кухаря, буд. 1, м. Київ, 02094, Україна

Телефон: 380442960409

Телефон: 380445732552

E-mail: users@bpci.kiev.ua

WWW: <http://bpci.kiev.ua/>

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Молекулярне моделювання і вивчення біоактивності нових гетероциклічних і макроциклічних сполук.

Назва роботи (англ)

Molecular modeling and bioactivity studies of new heterocyclic and macrocyclic compounds.

Мета роботи (укр)

Пошук, конструювання і встановлення властивостей нових потенційно біоактивних гетероциклічних і фосфорорганічних сполук, спрямованих на терапевтично важливі білкові мішені. Робота включатиме пошук і створення нових інгібіторів ензимів і синтетичних лігандів інших білків, з'ясування механізмів їх дії та вивчення зв'язку між структурою і активністю.

Мета роботи (англ)

Search, design and establishment of properties of heterocyclic and organophosphorus compounds potentially active against therapeutically important protein targets. The work will include the search and creation of new inhibitors of enzymes and synthetic ligands of other proteins, elucidation of their mechanisms of action and study of the relationship between structure and activity.

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: біоорганічна хімія, медична хімія, фармакологія

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	01.2025	12.2025	Проміжний звіт	Прогнозування біоактивності і оцінка властивостей синтетичних похідних азолів та інших гетероциклічних сполук як інгібіторів терапевтично важливих ензимів.
2	01.2026	12.2026	Проміжний звіт	Прогнозування і вивчення біоактивності нітрогеновмісних гетероциклів і макроциклічних сполук як інгібіторів гідролаз.
3	01.2027	12.2027	Проміжний звіт	Дослідження закономірностей і механізмів впливу функціоналізованих макроциклів на активність деяких гідролаз і трансфераз в модельних системах.
4	01.2028	12.2028	Проміжний звіт	Дослідження закономірностей і механізмів інгібування глутатіон-S-трансфераз та інших терапевтично важливих ензимів похідними конденсованих нітрогеновмісних гетероциклів.
5	01.2029	12.2029	Остаточний звіт	Вивчення зв'язку між структурою і біоактивністю органічних сполук з природними і синтетичними скафолдами.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31.23.23, 31.23.27.09, 31.27.37

Індекс УДК: 577.16, 547.96:577, 577.17;577.12.05

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Броварець Володимир Сергійович (д. х. н., професор, чл-кор.НАН України)

Керівники роботи:

Вовк Андрій Іванович (д.х.н., професор, чл-кор.НАН України)

Відповідальний за подання документів: Бондаренко О.М. (Тел.: +38 (044) 573-27-01)

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.