Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0123U102849

Відкрита

Дата реєстрації: 09-06-2023

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: 2201300

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 8834.314

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2023	2358.900
2024	3323.809
2025	3151.605

2. Замовник

Назва організації: Національний фонд досліджень України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 42734019

Адреса: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442981622

Телефон: 380442981622

3. Виконавець

Назва організації: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код ЄДРПОУ/ІПН: 02071205

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: майдан Свободи, буд. 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Телефон: 380577051247

E-mail: rector@karazin.ua

E-mail: univer@karazin.ua

WWW: http://www.univer.kharkov.ua/

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Молекулярний дизайн, синтез та скринінг нових потенційних противірусних фармацевтичних інгредієнтів для терапії інфекційного захворювання COVID-19

Назва роботи (англ)

Molecular design, synthesis and screening of new potential antiviral pharmaceutical ingredients for the treatment of infectious diseases COVID-19

Мета роботи (укр)

Мета проєкту – розробити фармакофорні, молекулярно-динамічні моделі, провести генерацію хімічного простору de novo за алгоритмом DAECS та виконати пошук нових інгібіторів протеаз вірусу SARS-CoV-2. Виходячи з механізмів специфічного зв'язування протеаз Mpro та PLpro з лігандами, провести конструювання інгібіторів подвійної дії, які є перспективними для розробки протикороновірусних лікарських засобів, та з урахуванням ADMET параметрів синтезувати молекули-лідери, визначити їх активність in vitro

Мета роботи (англ)

The project aims to develop pharmacophore, molecular-dynamic models, generate de novo chemical space according to the DAECS algorithm, and carry out screening for new inhibitors of SARS-CoV-2 virus proteases. Based on the mechanisms of specific binding of Mpro and PLpro proteases to ligands, design dual-acting inhibitors that are promising for developing anticoronavirus drugs and synthesize hit-molecules taking into account ADMET parameters, and, finally, determine their activity in vitro.

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

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 48 - прикладна

Очікувані результати: Матеріали

Галузь застосування: хімія, фармакологія

Експерти

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	05.2023	12.2023	Проміжний звіт	Вибір мішеней для моделювання молекул з високою цільовою специфічністю інгібування протеаз вірусу SARS-COV-2. Генерація хімічного простору de novo, проведення модельних розрахунків та розробка програмного комплексу для QSAR досліджень антивірусної активності органічних сполук
2	01.2024	12.2024	Проміжний звіт	Молекулярний скринінг та 3D-фармакофорний докінг віртуальних бібліотек нових сполук, структурна оптимізація молекул-хітів, генерація бібліотек оптимізованих структур та in silico оцінка їх активності як інгібіторів протеаз коронавірусу.Молекулярно-динамічне моделювання системи “молекула-хіт – протеаза SARSCoV-2”, розробка шляхів синтезу найбільш перспективних молекул-хітів з потенційною коронавірусною активністю, їх синтез, визначення чистоти та доведення хімічної будови
3	01.2025	12.2025	Остаточний звіт	Оптимізація синтетичних методів та синтез експериментальних зразків відібраних молекул-хітів для подальших досліджень. Проведення досліджень та узагальнення результатів скринінгу in vitro та відбір сполук-лідерів, які є перспективними активними фармацевтичними інгредієнтами для розробки протикороновірусних лікарських засобів прямої дії.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 31

Індекс УДК: 54 , 5616.98-036-07-08 + 615.281.8 + 577.151.4 + 54.057 + 547.022

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Пантелеймонов Антон Віталійович (к. х. н., доцент)

Керівники роботи:

Калугін Олег Миколайович (к.х.н., професор)

Відповідальний за подання документів: Собран Н. (Тел.: +38 (066) 803-49-28)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.