



Форма направления сведений о начинаемой научно-исследовательской, опытно-конструкторской и технологической работе гражданского назначения

**Номер государственного учета научно-исследовательской, опытно-конструкторской и технологической работы гражданского назначения (далее - НИОКТР)**

**Дата направления сведений о начинаемой НИОКТР**

122040800261-2

08.04.2022

**Наименование НИОКТР**

Направленный поиск, структурный дизайн и разработка методов синтеза потенциальных биологически активных веществ, конструирование лекарственных средств (новая лаборатория)

**Код (шифр) научной темы, присвоенной учредителем (организацией)**

FWUE-2022-0010

**Приоритетные направления развития науки, технологий и техники Российской Федерации<sup>1</sup>, утвержденные Указом Президента Российской Федерации от 7 июля 2011 г. № 899 «Об утверждении приоритетных направлений развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и перечня критических технологий Российской Федерации» (Собрание законодательства Российской Федерации, 2011, № 28, ст. 4168; 2015, № 51, ст. 7313) (далее соответственно - Указ Президента Российской Федерации от 7 июля 2011 г. № 899 и перечень)**

Науки о жизни

**Критические технологии Российской Федерации<sup>2</sup> согласно перечню, утвержденному Указом Президента Российской Федерации от 7 июля 2011 г. № 899**

Технологии снижения потерь от социально значимых заболеваний

**Приоритетные направления Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации<sup>3</sup>, утвержденные Указом Президента Российской Федерации от 1 декабря 2016 г. № 642 «О стратегии научно-технологического развития Российской Федерации» (Собрание законодательства Российской Федерации, 2016, № 49, ст. 6887)**

в) переход к персонализированной медицине, высокотехнологичному здравоохранению и технологиям здоровьесбережения, в том числе за счет рационального применения лекарственных препаратов (прежде всего антибактериальных);

**Научный задел**

1) Novel Inhibitors of DNA Repair Enzyme TDP1 Combining Monoterpenoid and Adamantane Fragments E.S. Mozhaitsev, A.L. Zakharenko, E.V. Suslov, D.V. Korchagina, O.D. Zakharova, I.A. Vasil'eva, A.A. Chepanova, E. Black, J. Patel, R. Chand, J. Reynisson, I.K. H. Leung, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, O.I. Lavrik Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry, E-pub Abstract Ahead of Print doi: 10.2174/1871520619666181207094243 IF=2.555 2) One-pot monoterpene alcohol amination over Au/ZrO<sub>2</sub> catalyst: Effect of the substrate structure Yu S. Demidova, E.V. Suslov, I.I. Simakova, E.S. Mozhaicev, D.V. Korchagina, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, A. Simakov, D.Yu. Murzin Journal of Catalysis 2018



substrate structure Yu.S. Demidova, E.V. Suslov, N.E. Simakova, E.S. Mozhajcev, D.V. Korchagina, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, A. Simakov, D.Yu. Murzin *Journal of Catalysis*, 2010, V. 360, Pages 127-134 doi: 10.1016/j.jcat.2018.01.020 IF=6.759 3) Aminoadamantanes Containing Monoterpene-derived Fragments as Potent Tyrosyl-DNA phosphodiesterase 1 Inhibitors K.Yu. Ponomarev, E.V. Suslov, A.L. Zakharenko, O.D. Zakharova, A.D. Rogachev, D.V. Korchagina, A. Zafar, J. Reynisson, A.A. Nefedov, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, O.I. Lavrik *Bioorganic Chemistry*, V.76, February 2018, Pp. 392-399 doi: 10.1016/j.bioorg.2017.12.005 IF=3.929 4) Anti-Influenza Activity of Diazaadamantanes Combined with Monoterpene Moieties E. Suslov, V.V. Zarubaev, A.V. Slita, K. Ponomarev, D. Korchagina, D.M. Ayine-Tora, J. Reynisson, K. Volcho, N. Salakhutdinov *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 2017, V. 27, N 19, Pp 4531-4535 doi: 10.1016/j.bmcl.2017.08.062 IF=2.453 5) Synthesis and Analgesic Activity of Amines Combining Diazaadamantane and Monoterpene Fragments K. Ponomarev, E. Morozova, A. Pavlova, E. Suslov, D. Korchagina, A. Nefedov, T. Tolstikova, K. Volcho, N. Salakhutdinov *Medicinal Chemistry*, 2017, V. 13, N 8, Pp 773 - 779 doi: 10.2174/1573406413666170525124316 IF=2.331 6) Selective one-pot carvone oxime hydrogenation over titania supported gold catalyst as a novel approach for dihydrocarvone synthesis Yu.S. Demidova, E.V. Suslov, O.A. Simakova, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, I.L. Simakova, D.Yu. Murzin *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, V. 420, August 2016, Pp 142-148 doi: 10.1016/j.molcata.2016.04.013 IF=3.957 7) Efficient reduction of nitroarenes using supercritical alcohols as a source of hydrogen in flow-type reactor in the presence of alumina V.P. Sivcev, D.V. Korchagina, E.V. Suslov, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, V.I. Anikeev *The Journal of Supercritical Fluids*, 2014, V. 86, Pp 137-144. doi: 10.1016/j.supflu.2013.12.012 IF=2.571 8) One-pot myrtenol amination over Au nanoparticles supported on different metal oxides Yu.S. Demidova, I.L. Simakova, M. Estrada, S. Beloshapkin, E.V. Suslov, D.V. Korchagina, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, A.V. Simakov, D.Y. Murzin *Applied Catalysis A: General*, 2013, V. 456, P. 348-356 doi: 10.1016/j.apcata.2013.06.013 IF=3.41 9) Preparation of chiral isobenzofurans from 3-carene in the presence of modified clays A.Yu. Sidorenko, I.V. Ilina, A.V. Kravtsova, A. Aho, O.V. Ardashov, N.S. Li-Zhulanov, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, D.Yu. Murzin, V.E. Agabekov *Molecular Catalysis*, 2018, V. 459, Pp 38-45 doi: 10.1016/j.mcat.2018.07.025 IF=4.21 10) A Novel Class of Tyrosyl-DNA Phosphodiesterase 1 Inhibitors That Contains the Octahydro-2H-chromen-4-ol Scaffold N.S. Li-Zhulanov, A.L. Zakharenko, A.A. Chepanova, Ji. Patel, A. Zafar, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, J. Reynisson, I.K. H. Leung, O.I. Lavrik *Molecules* 2018, 23(10), 2468; doi: 10.3390/molecules23102468 IF=3.098 11) Synthesis of D-(+)-camphor-based N-acylhydrazones and their antiviral activity K.S. Kovaleva, F.I. Zubkov, N.I. Bormotov, R.A. Novikov, P.V. Dorovatovskii, V.N. Khrustalev, Yu.V. Gatilov, V.V. Zarubaev, O.I. Yarovaya, L.N. Shishkin, N.F. Salakhutdinov *Med. Chem. Commun.*, 2018, V. 9, N 12, Pp 2072-2082 doi: 10.1039/C8MD00442K IF=2.342 12) One-pot synthesis of 1,5,3-oxathiazepanes via the three-component condensation of primary amines, formaldehyde and 2-mercaptoethanol K.S. Kovaleva, O.I. Yarovaya, D.S. Fadeev, N.F. Основным направлением работы лаборатории в 2021 году стал направленный поиск, структурный дизайн и разработка методов синтеза потенциальных биологически активных веществ, циклических сульфоновых производных на основе берберина, 1,2,4-оксадиазолов и O-ацилированных амидоксимов исходя из кетопиновой кислоты, ряда мочевины, тиомочевины, производных парабановой и тиопарабановой кислот сочетающих в своей структуре остатки монотерпеноидов и адамантановый фрагмент. Исследования проводились по нескольким направлениям: разработка методов получения и наработка в нужных для описания и проведения биологических экспериментов количествах целевых соединений; тестирование полученных соединений на противовирусную активность (вирус гриппа подтипов H1N1 и H7N9); тестирование полученных соединений на их ингибирующую активность в отношении фермента репарации ДНК тирозил-ДНК фосфодиэстеразы 1 (Tdp1). Разработаны методы направленных синтетических трансформаций растительных метаболитов и их производных с целью получения фармакологически перспективных соединений. Важнейший результат 2021 г. Впервые получен новый тип производных берберина с аннелированным четырёхчленным сульфоновым циклом. Показано, что реакция циклоприсоединения алкилсульфохлоридов к дигидроберберину протекает с высокой стереоселективностью и приводит к образованию одного стереоизомера. Синтезирован ряд новых замещенных 1,2,4-оксадиазолов, содержащих бициклический заместитель в положении 5 гетероцикла, в качестве предшественников данного типа соединений была проведена наработка соответствующих O-ацилированных амидоксимов. Новые соединения были получены исходя из (+)-кетопиновой кислоты. Цитотоксичность полученных веществ была исследована *in vitro* на клеточной линии MDCK, а их противовирусная активность изучалась в отношении вируса гриппа, подтипов H1N1 и H7N9. Обнаружено, что синтезированные соединения проявляли высокую вирусингибирующую активность в отношении вируса гриппа H1N1. Некоторые синтезированные соединения были также активны в отношении вируса гриппа другого антигенного подтипа: H7N9. Наиболее вероятным механизмом действия данных соединений является их взаимодействие с вирусным гемагглютинином. Методами молекулярного докинга было показано, что селективная противовирусная активность O-ацилированных амидоксимов и 1,2,4-оксадиазолов скорее всего связана с особенностями их строения. O-ацилированные амидоксимы вероятно, более комплементарны сайту связывания, расположенному в месте слитого пептида, а 1,2,4- оксадиазолы более комплементарны участку, расположенному в месте протеолиза. На основе аминопроизводных камфоленового и периллового спиртов, а также ментона и камфоры, их присоединением к 1-адамантанизо- и 1-адамантанизоцианатам были получены соответствующие мочевины и тиомочевины, которые далее взаимодействием с оксалилхлоридом превращали в N,N-замещенные производные парабановой и тиопарабановой кислот. Соединения данного типа показали свою ингибирующую активность в отношении фермента Tdp1 в нижнем микромольном диапазоне концентраций. Исходя из биспидинового различного строения был синтезирован ряд монотерпеноид замещенных производных, которые показали свою каталитическую активность в реакции никель катализируемого нуклеофильного присоединения Et<sub>2</sub>Zn к халкону. Впервые обнаружено образование продукта гидрирования двойной C-C халкона в значительных количествах в подобного типа превращениях. Список научных статей, опубликованных по теме НИР в 2019-2021 гг. 2021 год 1. Е.Д. Гладкова, О.А. Лузина, Н.Ф. Салахутдинов. Стереоселективное циклоприсоединение алкилсульфохлоридов к дигидроберберину // *Химия природных соединений*. - 2021. - Т. 6. - С. 910-912. doi: 10.1007/s10600-021-03550-4. 2. Е.В. Суслов, К.Ю. Пономарев, К.П. Волчо, Н.Ф. Салахутдинов. Азаадамантаны - новый перспективный каркасный блок для медицинской химии и фармакологии // *Биоорганическая химия*. - 2021. - Т. 47. - № 6. - С. 659-682.



doi:10.31857/S0132342321060233 3. И.С. Антипин, М.В. Алфимов, В.В. Арсланов, В.А. Бурилов, С.З. Вацадзе, Я.З. Волошин, К.П. Волчо, В.В. Горбачук, Ю.Г. Горбунова, С.П. Громов, С.В. Дудкин, С.Ю. Зайцев, Л.Я. Захарова, М.А. Зиганшин, А.В. Золотухина, М.А. Калинина, Э.А. Караханов, Р.Р. Кашапов, О.И. Койфман, А.И. Коновалов, В.С. Коренев, А.Л. Максимов, Н.Ж. Мамардашвили, Г.М. Мамардашвили, А.Г. Мартынов, А.Р. Мустафина, Р.И. Нугманов, А.С. Овсянников, П.Л. Падня, А.С. Потапов, С.Л. Селектор, М.Н. Соколов, С.Е. Соловьева, И.И. Стойков, П.А. Стужин, Е.В. Суслов, Е.Н. Ушаков, В.П. Федин, С.В. Федоренко, О.А. Федорова, Ю.В. Федоров, С.Н. Чвалун, А.Ю. Цивадзе, С.Н. Штыков, Д.Н. Шурпик, М.А. Щербина, Л.С. Якимова. Функциональные супрамолекулярные системы: дизайн и области применения // Успехи химии. – 2021. – Т. 90. – № 8. – С. 895-1107. doi: 10.1070/RCR5011 4. (патент) Четвертичные аммонийные соли диазаадамантанов, обладающие актопротекторной активностью Е.В. Суслов, К.П. Волчо, А.А. Котлярова, А.В. Павлова, К.Ю. Пономарев, Н.Ф. Салахутдинов, Т.Г. Толстикова Заявка 2021111248, приоритет от 21.04.2021, Патент РФ 2 760 459, Бюл. № 333, опубликовано: 25.11.2021. 5. (патент) Адамантилсодержащие производные 1,2,4-триазола и 1,3,4-тиадиазола, имеющие монотерпеноидные фрагменты, используемые в качестве ингибиторов фермента тирозил-ДНК-фосфодиэстеразы 1 А.А. Мункуев, А.Л. Захаренко, Е.В. Суслов, А.А. Чепанова, К.П. Волчо, О.И. Лаврик, Н.Ф. Салахутдинов Заявка 2020120994, приоритет от 18.06.2020, Патент РФ 2 761 880, Бюл. № 35, опубликовано: 13.12.2021 2020 год 6. Е.С. Можайцев, К.Ю. Пономарев, О.С. Патрушева, А.В. Медведько, А.И. Далингер, А.Д. Рогачев, Н.И. Комарова, Д.В. Корчагина, Е.В. Суслов, К.П. Волчо, Н.Ф. Салахутдинов, С.З. Вацадзе. Конъюгаты биспидина и монотерпеноидов как лиганды металлокомплексных катализаторов реакции Анри // Журнал органической химии. – 2020. – Т. 56. – № 11. – С. 1768-1783. doi:10.31857/S0514749220110129. doi: 10.1134/S1070428020110123. 7. E. V. Suslov, E. S. Mozhaytsev, D. V. Korchagina, N.I. Bormotov, O. I. Yarovaya, K. P. Volcho, O. A. Serova, A. P. Agafonov, R. A. Maksyutov, L.N. Shishkinab, N F. Salakhutdinov. New chemical agents based on adamantane-monoterpene conjugates against orthopoxvirus infections // RSC Medicinal Chemistry. – 2020. – V. 11. – N. 10. – P. 1185-1195. doi: 10.1039/D0MD00108B. 8. N.S. Li-Zhulanov, A.V. Pavlova, D.V. Korchagina, Yu.V. Gatilov, K.P. Volcho, T.G. Tolstikova, N.F. Salakhutdinov. Synthesis of 1,3-Oxazine Derivatives Based on (-)-Isopulegol using the Ritter Reaction and Study of their Analgesic Activity // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2020. – V. 56. – N 7. – P. 936-941. doi: 10.1007/s10593-020-02753-x. 9. V.V. Chernyshov, O.I. Yarovaya, R.Yu. Peshkov, N.F. Salakhutdinov. Synthesis of cyclic D (+)-camphoric acid imides and study of their antiviral activity // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2020. – V. 56. – N 6. – P. 763-768. doi: 10.1007/s10593-020-02728-y. 10. Yu.S. Demidova, E.S. Mozhaitsev, E.V. Suslov, A.A. Nefedov, A.A. Saraeva, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, A. Simakov, I.L. Simakova, D.Yu. Murzin. Menthylamine synthesis via gold-catalyzed hydrogenation of menthone oxime // Applied Catalysis A: General. – 2020. – V. 605. – 117799. doi: 10.1016/j.apcata.2020.117799. 11. Yu.S. Demidova, E.S. Mozhaitsev, A.A. Munkuev, E.V. Suslov, A.A. Saraev, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, I.L. Simakova, D.Yu. Murzin. Monoterpenoid Oximes Hydrogenation Over Platinum Catalysts // Topics in Catalysis. – 2020. – V. 63. – N 1-2. – P. 187-195. doi: 10.1007/s11244-020-01234-x. 12. A.A. Kotlyarova, K.Yu. Ponomarev, E.A. Morozova, D.V. Korchagina, E.V. Suslov, A.V. Pavlova, T.G. Tolstikova, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov. The effect of 3,7 diazabicyclo[3.3.1]nonanes containing monoterpenoid moieties on the physical activity of mice // Journal of research in pharmacy. – 2020. – V. 24. – N 2. – P. 196-204. doi: 10.35333/jrp.2020.136. 2019 год 13. K. Volcho, A. Zakharenko, O. Luzina, T. Khomenko, E. Suslov, O. Salomatina, O. Zakharova, N. Li-Zhulanov, J. Reynisson, O. Lavrik, N. Salakhutdinov. Tdp1 Inhibition as a Promising Approach to New Anticancer Drugs // 2nd Molecules Medicinal Chemistry Symposium: Facing Novel Challenges in Drug Discovery. Barcelona, Spain, 15-17 May 2019, P. 34. Proceedings 2019, 22(1), 35, DOI:10.3390/proceedings2019022035. 14. E.S. Mozhaitsev, A.L. Zakharenko, E.V. Suslov, D.V. Korchagina, O.D. Zakharova, I.A. Vasil'eva, A.A. Chepanova, E. Black, J. Patel, R. Chand, J. Reynisson, I.K. H. Leung, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, O.I. Lavrik. Novel Inhibitors of DNA Repair Enzyme TDP1 Combining Monoterpenoid and Adamantane Fragments // Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry, 2019, V. 19, N 4, Pp 463-472 doi:10.2174/1871520619666181207094243. 15. Е.В. Суслов, К.Ю. Пономарев, Д.В. Корчагина, К.П. Волчо, Н.Ф. Салахутдинов. Синтез диазаадамантанов на основе 1,5-диметилбиспидинона и некоторых природных кетонов // Известия Академии наук. Серия химическая. 2019. № 3. С. 601-605. doi:10.1007/s11172-019-2461-z 16. A.A. Chepanova, E.S. Mozhaitsev, A.A. Munkuev, E.V. Suslov, D.V. Korchagina, O.D. Zakharova, A.L. Zakharenko, Ji. Patel, D.M. Ayine-Tora, J. Reynisson, I.K. H. Leung, K.P. Volcho, N.F. Salakhutdinov, O.I. Lavrik. The Development of Tyrosyl-DNA Phosphodiesterase 1 Inhibitors. Combination of Monoterpene and Adamantine Moieties via Amide or Thioamide Bridges // Applied Sciences, 2019, 9(13), 2767. doi:10.3390/app9132767

## Вид исследования (разработки)

Фундаментальное исследование

## Аннотация

Цель проекта: направленный поиск, структурный дизайн и разработка методов синтеза потенциальных биологически активных веществ выявление среди них соединений-лидеров. Достижение поставленной цели приведет разработке новых современных методов трансформации природных соединений, в том числе включая превращения на гетерогенных и гомогенных катализаторах, что позволит синтезировать обширные библиотеки новых фармакологически активных веществ, а так же к получению новых фундаментальных знаний о взаимодействии “лекарство – биологический эффект”. В перспективе это будет способствовать разработке новых отечественных высокоэффективных низкотоксичных лекарственных препаратов для лечения социально значимых заболеваний (онкологические заболевания,



инфекционные заболевания и т.д.). Актуальность проблемы, предлагаемой к решению Высокое химическое разнообразие, доступность базовых соединений из возобновляемых источников с высокой оптической чистотой, как и присущая многим из них комплементарностью к мишеням биологического происхождения делают природные вещества важными стартовыми субстратами для разработки новых фармакологических агентов. Данное утверждение подтверждается тем фактом, что примерно половина лекарственных средств, внедренных в медицинскую практику в период 1981-2014 гг., так или иначе связана с природными соединениями [Newman and Cragg, J. Nat. Prod. 2016, 79, 6297661]. Разработка новых низкомолекулярных высокоэффективных низкотоксичных лекарственных препаратов остается одной из актуальнейших задач современной медицинской химии. Для решения этой задачи могут применяться несколько подходов – модификация уже известных лекарственных препаратов и поиск среди соединений, обладающих близкой физиологической активностью, а также скрининг, в том числе с применением компьютерного моделирования, библиотек вновь синтезированных соединений. И во всех этих направлениях за счет своей уникальности используются природные соединения. Описание задач, предлагаемых к решению Для достижения поставленной цели, будут решены следующие задачи: 1) проведен поиск и создание новых высокоэффективных, низкотоксичных отечественных лекарственных средств для лечения и профилактики социально значимых заболеваний на основе а) направленной модификации природных соединений (алкалоидов, терпеноидов, кумаринов, флаваноидов и т.п.) б) анализа и модификации структур известных природных биологически активных соединений; в) синтеза и биологического тестирования широкого разнообразия химических соединений; 2) проведена направленная модификация природных соединений для создания биологически активных соединений, действующих на две и более фармакологические мишени (мультицелевых лекарств); 3) создание на основе природных соединений и их производных новых высокоэффективных и безопасных систем доставки лекарств; 4) разработаны новые регио- и стереоселективных подходов и методов синтеза для модификации природных соединений для получения целевых веществ, в том числе и с применением гетерогенных и гомогенных каталитических систем; 5) совершенствование структуры соединений-лидеров с целью повышения их фармакодинамических и фармакокинетических характеристик, а также активности и селективности с применением для этого таких приемов как синтез структурных аналогов по принципу трехмерного фармакофорного подобия, изменение конформационной подвижности исходной молекулы, биоизостерическая замена, изменение баланса липофильных и гидрофильных групп, создание пептидомиметиков, изменение метаболизируемых групп и т.п.; б) тестирование на различных биологических и физиологических (in vitro и in vivo) моделях разработанных и синтезированных производных природных соединений для изучения особенностей их взаимодействия с молекулярными мишенями организма, а также с целью отбора наиболее перспективных препаратов проведение на основе валидированных моделей различных патологий скрининговых исследований Для достижения поставленной цели, будут решены следующие задачи: 1) проведен поиск и создание новых высокоэффективных, низкотоксичных отечественных лекарственных средств для лечения и профилактики социально значимых заболеваний на основе а) направленной модификации природных соединений (алкалоидов, терпеноидов, кумаринов, флаваноидов и т.п.) б) анализа и модификации структур известных природных биологически активных соединений; в) синтеза и биологического тестирования широкого разнообразия химических соединений; 2) проведена направленная модификация природных соединений для создания биологически активных соединений, действующих на две и более фармакологические мишени (мультицелевых лекарств); 3) создание на основе природных соединений и их производных новых высокоэффективных и безопасных систем доставки лекарств; 4) разработаны новые регио- и стереоселективных подходов и методов синтеза для модификации природных соединений для получения целевых веществ, в том числе и с применением гетерогенных и гомогенных каталитических систем; 5) совершенствование структуры соединений-лидеров с целью повышения их фармакодинамических и фармакокинетических характеристик, а также активности и селективности с применением для этого таких приемов как синтез структурных аналогов по принципу трехмерного фармакофорного подобия, изменение конформационной подвижности исходной молекулы, биоизостерическая замена, изменение баланса липофильных и гидрофильных групп, создание пептидомиметиков, изменение метаболизируемых групп и т.п.; б) тестирование на различных биологических и физиологических (in vitro и in vivo) моделях разработанных и синтезированных производных природных соединений для изучения особенностей их взаимодействия с молекулярными мишенями организма. а также с целью отбора наиболее перспективных препаратов проведение на основе



валидированных моделей различных патологий скрининговых исследований Предполагаемые (ожидаемые) результаты и их возможная практическая значимость (применимость) Ожидаемые результаты состоят в получении новых фундаментальных научных данных о величине биологической активности, в т.ч. токсичности, библиотеки органических соединений природного происхождения и их функциональных производных, содержащих в структуре фрагменты каркасных углеводородов. Ожидается, что наличие подобных заместителей окажет значительное влияние на величину биологической активности вследствие ожидаемого повышения липофильности молекул и заметного влияния на характер межмолекулярных взаимодействий из-за большого объема и неполярного характера заместителей. Практический результат будет состоять в создании библиотеки химических соединений и количественных результатах измерений их биологической активности, значения которых станут одним из критериев для принятия решения о целесообразности проведения предклинических и клинических исследований новых фармакологических субстанций

**Тематическая (-ие) рубрика (-и) в соответствии с государственным рубрикаторм научно-технической информации (далее - ГРНТИ)**

**Индекс Универсальной десятичной классификации**

31.23.00 : Биоорганическая химия. Природные органические соединения и их синтетические аналоги

547.9 577.1

**Классификатор, разработанный Организацией экономического сотрудничества и развития (далее - ОЭСР)<sup>4</sup>**

1.4.1 : Органическая химия

3.1.6 : Медицинская химия

**Обоснование междисциплинарного подхода (в случае указания разных тематических рубрик первого уровня ГРНТИ/ОЭСР)**

Объекты исследования - органические соединения, которые проявляют определенный тип биологической активности, эффективность в отношении социально значимых заболеваний. В этой связи специфика работ существенно отличается от исключительно химического органического синтеза, а приобретает отличия, обусловленные необходимостью получения библиотек органических соединений, различающихся по отдельным структурным элементам; органическими, которые связаны с исключением из процедуры синтеза ряда токсичных соединений; высоких требованиях к чистоте получаемых образцов соединений; согласования химических процессов с биологическими задачами (например, обеспечение растворимости, способ введения, максимальная концентрация, период полувыведения) с целью отбора перспективных соединений-кандидатов для доклинических и клинических исследований.

**Ключевые слова**

биологическая активность

медицинская химия

конструирование лекарственных средств

Природные соединения

каркасные терпеноиды

**Наименование государственной программы, в соответствии с которой проводится работа<sup>5</sup>**

Фундаментальные и поисковые научные исследования

**Наименование федеральной целевой программы, в соответствии с которой проводится работа<sup>6</sup>**

Нет данных

**Наименование межгосударственной целевой программы**

Нет данных

**Научное и научно-техническое сотрудничество, в том числе международное**

Лаборатория реализует научное сотрудничество с рядом организаций. Наиболее тесные научные связи в настоящий момент реализуются с Московским государственным университетом им. М.В. Ломоносова (д.х.н. С.З. Вацадзе), ФИЦ ИК СО РАН (к.х.н. Ю.С. Демидова, изучение каталитических превращений терпенов), ГНЦ ВБ "Вектор" Роспотребнадзора (проведение скрининговых исследований на псевдовирусных моделях)

**Наименование национального проекта, в соответствии с которым проводится работа**

Нет данных

**Наименование федерального проекта, в соответствии с которым проводится работа**

Нет данных

**Работа выполняется в рамках деятельности научно-образовательного центра мирового уровня**

Нет данных

**Работа выполняется в рамках деятельности научного центра мирового уровня**

Нет данных

**Работа выполняется центром компетенций Национальной технологической инициативы**

Нет данных

**Работа выполняется в рамках федеральной научно-технической программы**

Нет данных

**Работа выполняется в рамках комплексной научно-технической программы полного инновационного цикла и комплексного научно-технического проекта полного инновационного цикла**

Нет данных

Основание проведения НИОКТР <sup>14</sup>	Дата документа	Номер документа
Государственное задание	24.12.2021	15326-03-13-660

**Способ определения исполнителя**

--

Сроки выполнения работы:	Дата начала	Дата окончания
	01.01.2022	31.12.2024

Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	29808,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		

**Количество этапов работы**

3
---

Сведения об этапах НИОКТР (заполняется для каждого из этапов работы отдельно):

**Название этапа**

Этап 2022
-----------

Сроки выполнения этапа работы:	Дата начала этапа	Дата окончания этапа
	01.01.2022	31.12.2022



Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	9374,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		

**Название этапа**

Этап 2023

Сроки выполнения этапа работы:	Дата начала этапа	Дата окончания этапа
	01.01.2023	31.12.2023

Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	9906,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		



**Название этапа**

Этап 2024
-----------

Сроки выполнения этапа работы:	Дата начала этапа	Дата окончания этапа
	01.01.2024	31.12.2024

Источник финансирования	Планируемый объем финансирования, тыс. рублей	Коды бюджетной классификации
Средства федерального бюджета	10528,000	075 0110 47 4 01 92062 611
Средства бюджетов субъектов РФ		
Собственные средства организаций		
Средства местных бюджетов		
Средства фондов поддержки научной и (или) научно-технической деятельности		
Средства бюджета межгосударственной целевой программы		
Средства хозяйствующих субъектов		
Средства финансово-кредитных организаций		

**Общее количество отчетов о НИОКТР, планируемых к подготовке (включая промежуточные)**

3
---

**Сведения о Заказчике или Фонде**

Организация				
Общероссийский классификатор организационно -правовой формы (далее - ОКОПФ) <sup>15</sup>	Наименование организации	Сокращенное наименование организации	Учредитель (ведомственная принадлежность) <sup>16</sup>	Основной государственный регистрационный номер (далее - ОГРН)
75104 : Федеральные государственные казенные учреждения	МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ	МИНОБРНАУКИ РОССИИ	1322600 : Министерство науки и высшего образования Российской Федерации	1187746579690



### Сведения об Исполнителе

Организация				
Общероссийский классификатор организационно - правовой формы (далее - ОКОПФ) <sup>15</sup>	Наименование организации	Сокращенное наименование организации	Учредитель (ведомственная принадлежность) <sup>16</sup>	Основной государственный регистрационный номер (далее - ОГРН)
75103 : Федеральные государственные бюджетные учреждения	ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ НОВОСИБИРСКИЙ ИНСТИТУТ ОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ИМ. Н.Н. ВОРОЖЦОВА СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК	НИОХ СО РАН	1322600 : Министерство науки и высшего образования Российской Федерации	1025403651921

### Сведения о соисполнителях

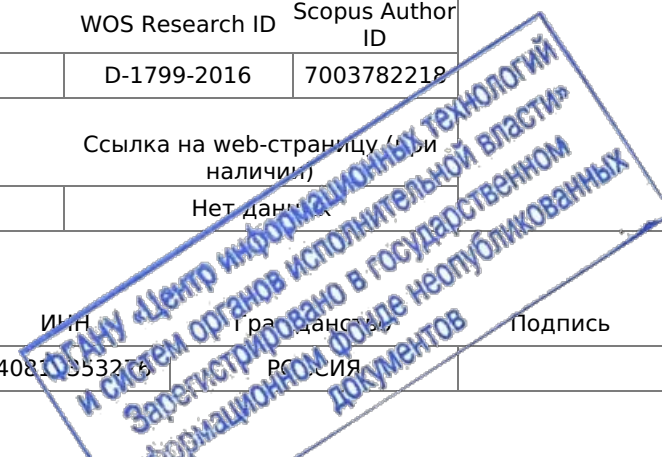
Нет данных

### Руководитель работы

Фамилия	Имя	Отчество	Должность	Ученая степень	Ученое звание	Подпись
Сулов	Евгений	Владимирович	старший научный сотрудник, заведующий лабораторией	Кандидат химических наук	Отсутствует	
СНИЛС	ИНН	Гражданство	Дата рождения	WOS Research ID	Scopus Author ID	
06380408856	540816408700	РОССИЯ	14.01.1982	D-1799-2016	7003782218	
Идентификационный номер в системе Российского индекса научного Цитирования (при наличии)			ORCID	Ссылка на web-страницу (при наличии)		
Нет данных			0000-0003-0988-0502	Нет данных		

### Руководитель организации-исполнителя

Фамилия	Имя	Отчество	Должность	СНИЛС	ИНН	Гражданство	Подпись
Багрянская	Елена	Григорьевна	Директор	00670954143	540816408700	РОССИЯ	





М.П.