



Информация за финансиран проект

Наименование на конкурса:
КОНКУРС ЗА ФИНАНСИРАНЕ НА ФУНДАМЕНТАЛНИ НАУЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ ПО ОБЩЕСТВЕНИ ПРЕДИЗВИКАТЕЛСТВА – 2018 г.
Основна научна област или обществен приоритет:
<u>Обществен приоритет:</u> Подобряване на качеството на живот – храни, здраве , биоразнообразие, опазване на околната среда, градска среда и транспорт и др. <u>Основна научна област:</u> Математически науки и информатика <u>Допълнителна научна област:</u> Химически науки
Входящ № на проект:
ОПР 03/4
Заглавие на проекта:
РАЗРАБОТВАНЕ И ВАЛИДИРАНЕ НА <i>IN SILICO</i> МЕТОД ЗА ИДЕНТИФИЦИРАНЕ НА БИОТЕРАПЕВТИЦИ В ПЕПТИДНИ СМЕСИ С ПРИРОДЕН ПРОИЗХОД
Базова организация:
ИНСТИТУТ ПО ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ ТЕХНОЛОГИИ – БАН
Партньорски организации:
1. ИНСТИТУТ ПО ОРГАНИЧНА ХИМИЯ С ЦЕНТЪР ПО ФИТОХИМИЯ – БАН 2. СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ “СВ. КЛ. ОХРИДСКИ”
Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):
Доц. д-р Невена Илиева
Общ размер на отпуснатото финансиране:
120 000.00 лв.
Разпределение на сумата по проекта между базовата организация и партньорите
Организация:
ИНСТИТУТ ПО ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ ТЕХНОЛОГИИ – БАН
Сума: 50 400.00 лв.
Организация:
ИНСТИТУТ ПО ОРГАНИЧНА ХИМИЯ С ЦЕНТЪР ПО ФИТОХИМИЯ – БАН
Сума: 45 600.00 лв.
Организация:
СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ “СВ. КЛ. ОХРИДСКИ”
Сума: 24 000.00 лв.



Резюме на проекта:

Настоящият проект е в областта на **биоматематиката и биокомпютинга** и е насочен към **глобален проблем от изключителна значимост** – непрекъснатото увеличаване на броя на мултирезистентните бактериални щамове, което води до нарастваща неефективност на съществуващите традиционни антибиотици. Характеристиките, широкият спектър и до голяма степен неспецифичната активност на антимикробните пептиди (АМП), както естествени, така и синтетични, ги квалифицират като възможни кандидати за терапевтични алтернативи, а потенциалните им клинични приложения предизвикват все по-голям интерес, превръщайки **теоретичните и експериментални изследвания на пептид-мембранните взаимодействия** в една **от най-горещите изследователски теми**.

Доброто разбиране на процеса на взаимодействие би изяснило действителните механизми на антимикробна активност на АМП, което от своя страна е решаващо за развитието на нови биологично активни продукти като алтернатива на антибиотиците при резистентни бактериални щамове. Необходимата за целта структурна информация е **трудно, а често и невъзможно да бъде получена експериментално**.

Компютърното моделиране и като цяло компютърните изследвания, известни също като **in silico експерименти**, спомагат значително за преодоляване на тази трудност и **позволяват ускоряване и значително намаляване на разходите за пълния изследователски процес**.

Целта на настоящия проект е **разработването на in silico подход за идентифициране на активните компоненти в мултикомпонентни пептидни субстанции с естествен произход** въз основа на динамиката на съответните пептид-мембранни взаимодействия. За постигането ѝ ще използваме **математично моделиране и разнообразни техники за високопроизводителни пресмятания**, но също така ще разработим специални методи за нагъване на протеини с къса аминокиселинна последователност, геометрични и динамични анализи за идентифициране на потенциални биологични вещества в многокомпонентни течности. Като **експериментална валидиране** на предложения подход целим изолирането на нови пептиди от молюски с инхибираща активност срещу бактерии, идентифицирани като мултирезистентни високорискови патогени.

Предложеният изследователски проект обхваща **теоретични изследвания, насочвани и валидирани чрез експериментални тестове**. Той е **интердисциплинарен** по своята същност и обединява експерти в областите **биомоделиране, биохимия, физика, молекулярна биология, фармакология и високопроизводителни научни пресмятания**.



Членове на научния колектив

<i>Организации/участници¹</i>	<i>Бележка²</i>
Базова организация:	
ИНСТИТУТ ПО ИНФОРМАЦИОННИ И КОМУНИКАЦИОННИ ТЕХНОЛОГИИ - БАН	
<i>Ръководител на научния колектив</i>	
Доц. д-р Невена Петрова Илиева	
<i>Участници:</i>	
Гл. асист., д-р Елена Боянова Лилкова	МУ, ПД
Снежина Ивелинова Димитрова	ДО
Проф. Волфганг Шрайнер (Институт по биосимулации и биоинформатика, Медицински университет – Виена, Австрия)	УЧ
Проф. Антти Ниemi (NORDITA и университет Уппсала, Швеция)	УЧ
Д-р Шубиао Пенг (Пекински технологичен институт, Китай)	УЧ,МУ,ПД
Янджън Хоу (Пекински технологичен институт, Китай)	УЧ,ДО
<i>Партньорска организация:</i>	
ИНСТИТУТ ПО ОРГАНИЧНА ХИМИЯ С ЦЕНТЪР ПО ФИТОХИМИЯ-БАН	
<i>Участници:</i>	
Проф. д-р Павлинка Александрова Долашка	
Проф. д-р Светлана Димитрова Симова	
Гл. асист., д-р Александър Константинов Долашки	
Гл. асист., д-р Людмила Георгиева Велкова	
Десислава Пламенова Гергинова	ДО
<i>Партньорска организация:</i>	
СОФИЙСКИ УНИВЕРСИТЕТ „СВ. КЛ. ОХРИДСКИ“	
<i>Участници:</i>	
Проф. д-р Леандър Борисов Литов	
Гл. асист., д-р Пейчо Стоев Петков	
Доц. д-р Борислав Атанасов Павлов	

Общ брой млад учен (МУ) 2

Общ брой постдокторант (ПД) 2

Общ брой докторанти (ДО) 3

Общ брой студенти (СТ) /

¹ Отбележете академичната длъжност, научната степен, име и фамилия на всеки участник

² Отбележете дали участникът в колектива е млад учен (МУ), постдокторант (ПД), докторанти (ДО) или студенти (СТ), пенсионер (ПН) или учен от чужбина (УЧ) и съответната бройка.