Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0119U102721

Відкрита

Дата реєстрації: 25-07-2019

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

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 93.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2019	31.000
2020	62.000

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 теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417124

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Метрологічна, буд. 14-б, м. Київ, 03143, Україна

Телефон: 380445265998

Телефон: 380445265362

E-mail: itp@bitp.kiev.ua

WWW: http://bitp.kiev.ua

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Комп'ютерне моделювання багаточастинкових систем із кулонівською взаємодією: від плазми до біологічних макромолекул

Назва роботи (англ)

Computer simulation of many-particle systems with Coulomb interaction: from plasma to biological macromolecules

Мета роботи (укр)

Метою роботи є дослідження перенесення частинок випадковим електричним полем та впливу зовнішнього електричного поля на механіку макромолекули ДНК. Оцінка часу утримання плазми в пристроях керованого термоядерного синтезу потребує коректного опису процесів аномального перенесення, які спричинені сильними турбулентними полями. Для дослідження механізмів такого перенесення розглядають моделі, що ґрунтуються на мікроскопічному описі. В таких підходах для слабких полів використовують припущення гаусовості процесу, яке не працює для інтенсивних низькочастотних полів. В попередніх дослідженнях було показано, що причиною аномального перенесення в таких полях є захоплення частинок полем. Найбільш яскраво ефект проявляється в двовимірному перенесенні випадковим електричним полем поперек магнітного, для якого нами було сформульовано аналітичне наближення. Нашою метою є узагальнення наближення для врахування повздовжнього руху та аналіз впливу повздовжнього руху на різні групи захоплених частинок. В процесі життєдіяльності клітини макромолекула ДНК постійно зазнає впливу зовнішніх факторів: механічних сил, локальних електричних полів, утворення стійких комплексів з молекулами середовища. В середовищі клітини форма подвійної спіралі, вторинна структура ДНК, стабілізована молекулами води та протиіонами. Від структури середовища залежить форма, стабільність та наявність механічних напружень в структурі подвійної спіралі. Оскільки макромолекула ДНК є основним носієм генетичної інформації в клітині і зміна її стабільності може вплинути на всі життєво важливі фізіологічні процеси, то взаємодія макромолекули ДНК із молекулами середовища потребує фундаментального дослідження сучасними методами комп'ютерного моделювання. Зокрема, важливо дослідити методом молекулярної динаміки процес дії зовнішнього електричного поля на механіку макромолекули ДНК в іонно-гідратному розчині.

Мета роботи (англ)

The purpose of this work is to study particle transport caused by a random electric field and to study the influence of an external electric field on the mechanics of a DNA macromolecule. A correct approach to anomalous transport that is caused by strong turbulent fields is needed to estimate a plasma confinement time in the fusion devices. The models that based on microscopic approach are used to study basic mechanisms of such transport. For low-intensity fields in these approaches, the assumption of Gaussian process is applied, which is not valid for intensive low-frequency fields. The particle trapping is the reason of anomalous transport in these fields that demonstrated in previous studies. This effect is most pronounced in a two-dimensional transport by a random electric field across magnetic one, for which we formulated analytical approximation. We aim for generalization of our approximation to account the particle motion along magnetic field and for analysis of effects of this motion on different groups of trapped particles. DNA macromolecule always exposed to external factors during a life cycle of a cell: mechanical forces, local electric fields, the formation of stable complexes with medium molecules. In media of cell, a form of a double helix is stabilized - a secondary structure of DNA by water molecules and the counterions. Shape, presence of mechanical tension in a structure and stability of a double helix depend on a configuration of a medium. Since the DNA macromolecule is the main carrier of genetic information in the cell and changes in its stability can affect all vital physiological processes, the interaction of the DNA macromolecule with the environmental molecules requires a fundamental study by modern methods of computer modeling. In particular, it is important to investigate the process of the action of an external electric field on the mechanics of a DNA macromolecule in an ion-hydrated solution by the method of molecular dynamics.

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: наука, освіта

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	07.2019	12.2019	Проміжний звіт	Комп'ютерне моделювання перенесення у плазмі та процесу дії зовнішнього електричного поля на макромолекулу ДНК
2	01.2020	12.2020	Остаточний звіт	Обробка й аналіз результатів комп'ютерного моделювання, підготовка публікацій за результатами проведеної роботи

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 28.17.23, 29.27, 31.23.30

Індекс УДК: 519.713;519.711:53, 533.9, 577.213/.216

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Загородній Анатолій Глібович (д. ф.-м. н., професор, акад.)

Керівники роботи:

Черняк Олександр Миколайович (к. ф.-м. н.)

Відповідальний за подання документів: Черняк Олександр Миколайович (Тел.: +38 (098) 961-87-40)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.