Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0211U013363

Державний реєстраційний номер: 0111U007526

Відкрита

Дата реєстрації: 26-12-2011

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Конформаційний аналіз цукрових залишків ДНК та РНК методами MP2 та DFT

Початок етапу: 09-2011

Закінчення етапу: 12-2011

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417101

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 03680 Київ, вул. Заболотного, 150

Телефон: (044)526-0759

Інше: http:

Інше:

Інше: imbg.org.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Державне агентство з питань електронного урядування України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 37471818

Адреса: вул. Ділова, 24, м. Київ, Київ, 03150, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 2071730

WWW: http://e.gov.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 5031080

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 50 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Конформаційна мінливість 2'-дезоксирибонуклеозидів та 2'-рибонуклеозидів: квантово-хімічне дослідження

Назва роботи (англ)

Conformational capacity of 2'-deoxyribonucleosides and 2'-ribonucleosides: a quantum-chemical study

Реферат (укр)

Квантово-хімічними розрахунками методами MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) та MP2/6-311++G(d,p)//MP2/6-31G(d,p) проведено повний конформаційний аналіз цукрових залишків, що входять до складу ДНК та РНК, а саме 1,2-дидезоксирибози та 1-дезоксирибози відповідно. Визначено енергетичні та структурні характерис-тики всіх конформері. У рамках теорії QTAIM встановлено наявність внутрішньомолекулярних Н-зв'язків у всіх конфор-мерах.

Реферат (англ)

A complete conformational analysis of sugar residues that are part of DNA and RNA, namely 1,2-dydezoksyrybozy and 1-deoxyribose, was done by quantum-chemical calculations methods MP2/6-311 + + G (d, p) / / DFT B3LYP/6-31G (d, p) and MP2/6-311 + + G (d, p) / / MP2 / 6 -31G (d, p) . The energy and structural characteristics of all conformers are determined. Within the QTAIM theory the presence of intramolecular H-bonds in all conformers is established.

Індекс УДК: 577.32, 577.332

Коди тематичних рубрик НТІ: 34.15.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Повне конфомаційне сімейство цукрових залишків ДНК та РНК

Назва продукції (англ): Full conformational family of DNA and RNA sugar residues

Очікувані результати:

Галузь застосування: К 73.10.0

Опис продукції (укр): Квантово-хімічними розрахунками методами MP2/6-311++G(d,p)//DFT B3LYP/6-31G(d,p) та MP2/6-311++G(d,p)//MP2/6-31G(d,p) проведено повний конформаційний аналіз цукрових залишків, що входять до складу ДНК та РНК, а саме 1,2-дидезоксирибози та 1-дезоксирибози відповідно. Визначено енергетичні та структурні характерис-тики всіх конформерів, а також температурні залежності відношення заселе-ностей конформерів з S конформацією цукру до конформерів з N конформа-цією у діапазоні температур 298,15-420 K. У рамках теорії QTAIM встановлено наявність внутрішньомолекулярних Н-зв'язків у всіх конфор-мерах.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: -

Виробник продукції: ІМБГ

Споживачі продукції: наукові установи

Перспективні ринки: Україна, світ

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 34

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Л.Г. Горб

О.О. Броварець

Р.О. Жураківський

Керівник організації:

Єльська Ганна Валентинівна (д. б. н., акад.)

Керівники роботи:

Говорун Дмитро Миколайович

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.