Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0223U000752

Державний реєстраційний номер: 0121U111838

Відкрита

Дата реєстрації: 19-01-2023

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Проаналізувати отримані траєкторії, розрахувати зміну конформаційних параметрів молекули ДНК під дією електричного поля, а також густину коливальних станів молекул води. Оформити публікації за результатами виконаної роботи

Початок етапу: 01-2022

Закінчення етапу: 12-2022

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. 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

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05417124

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

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Телефон: 380445265998

Телефон: 380445265362

E-mail: itp@bitp.kiev.ua

WWW: http://bitp.kiev.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: 6541030

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 130.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Комп'ютерне моделювання динаміки подвійної спіралі ДНК та її іон-гідратного оточення в зовнішньому електричному полі

Назва роботи (англ)

Computer simulations of the dynamics of a DNA double helix and its ion-hydration environment in an external electric field

Реферат (укр)

Метою роботи є дослідження методами комп'ютерного моделювання динаміки макромолекули ДНК під дією зовнішнього електричного поля, а також взаємодії атомних груп ДНК з її іон-гідратним оточенням. Макромолекула ДНК в ядрі живої клітини знаходиться в розчині, який здебільшого складається з молекул води та протиіонів. Склад цього розчину відіграє вирішальну роль у стабілізації ДНК у вигляді подвійної спіралі, визначає її форму, а також впливає на її стабільність. Відповідно, якщо характер цього розчину певним чином змінити, це вплине на всі подальші процеси функціонування ДНК в клітині, а також на процеси передачі генетичної інформації. У взаємодії ДНК з її іон-гідратним оточенням можна виділити два важливих аспекти — взаємодія з протиіонами, а також взаємодія із гідратною оболонкою (молекулами води). В першій частині роботи досліджено механіку макромолекули ДНК під дією зовнішнього електричного поля. Будуть проведені симуляції системи з макромолекули ДНК у водно-іонному розчині для різних значень частоти та амплітуди зовнішнього періодичного електричного поля. З отриманих результатів моделювання розраховано конформаційні параметри подвійної спіралі ДНК, зокрема параметри ступенів вільності нуклеїнових основ у комплементарних парах, а також параметри рухів пар основ в цілому відносно інших пар основ. Також знайдено частоту зовнішнього поля, за якої амплітуда коливань конформаційних параметрів є максимальною. В другій частині роботи буде досліджена взаємодія макромолекули ДНК з її гідратною оболонкою. Буде проведено моделювання системи з олігомеру ДНК, нейтралізованого протиіонами, у водяному кубі. Буде розраховано густину коливальних станів молекул води відносно атомних груп ДНК у різних гідратних оболонках макромолекули, а також у жолобах подвійної спіралі. Розраховану залежність густини коливальних станів від частоти буде порівняно з експериментальними спектрами інфрачервоного поглинання, а також комбінаційного розсіяння.

Реферат (англ)

The aim of the present work is to study the dynamics of a DNA macromolecule under the action of an external electric field, as well as the interaction of DNA atomic groups with its ion-hydrate environment within modern computer simulation methods. The DNA macromolecule in a cell nucleus is situated in a solution, which consists mainly of water molecules and counterions. The composition of this solution plays a crucial role in the stabilization of DNA as a double helix, determines its shape, and also affects its stability. Accordingly, if the nature of this solution is somehow changed, it will affect all subsequent processes of DNA function in the cell, as well as the genetic information transfer processes. In the interaction of DNA with its ion-hydrate environment, two important aspects can be distinguished - interaction with counterions, as well as interaction with the hydration shell (water molecules). In the first part of the present work, classical all-atom molecular dynamics will be used to study the mechanics of the DNA macromolecule under the action of an external electric field. The system consisting of a DNA macromolecule in an aqueous-ionic solution will be simulated for different values of frequency and amplitude of the external periodic electric field. From the obtained simulation results, the conformational parameters of the DNA double helix will be calculated, in particular, the parameters of nucleic bases in complementary pairs, as well as the parameters of base-pair movements in general with respect to the other base pairs. The frequency of the external field at which the amplitude of oscillations of these parameters is maximal will also be found. The second part of the work will investigate the interaction of the

DNA macromolecule with its hydration shell. The vibrational density of states for water molecules with respect to the DNA atomic groups in different hydration shells of the macromolecule will be calculated.

Індекс УДК: 577.3.01;577.38;577.3.001.57, 577.3.01;577.38;577.3.001.57, 577.3.01;577.38;577.3.001.57, 577.3.01;577.38;577.3.001.57, 577.3.01;577.38;577.3.001.57

Коди тематичних рубрик НТІ: 34.17.03, 34.17.03, 34.17.03, 34.17.03, 34.17.03

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Наукові публікації

Назва продукції (англ): Scientific publications

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Фізико-математичні науки

Опис продукції (укр): Відправлено публікацію до Європейського Біофізичного Журналу (European Biophysics Journal)

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження:

Виробник продукції: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: В Україні

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 19

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Здоревський Олексій Олександрович

Керівник організації:

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

Керівники роботи:

Бубон Тетяна Леонідівна

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.