Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0215U001040

Державний реєстраційний номер: 0114U006522

Відкрита

Дата реєстрації: 14-01-2015

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Квантово-хімічне моделювання молекулярних механізмів мутагенної таутомеризації Вотсон-Криківських пар основ ДНК одинарним перенесенням протону як у вільному стані, так і у слабкополярному оточенні, характерному для активного центру високоточної реплікативної ДНК-полімерази у складі реплісоми. Порівняльний аналіз отриманих результатів із літературними експериментальними даними, зокрема частотами помилок реплікації, належна квантово-хімічна інтерпретація існуючих експериментальних даних та планування нових "прицільних" молекулярно-біологічних дослідів.

Початок етапу: 12-2014

Закінчення етапу: 12-2014

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) 526-5589

Інше: imbg.org.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.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: 2209020

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 60 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Мутагенна таутомеризація Вотсон-Криківських пар основ ДНК одинарним перенесенням протону: квантово-хімічне дослідження

Назва роботи (англ)

Mutagenic tautomerisation of the Watson-Crick DNA base pairs via single proton transfer: quantum-chemical study

Реферат (укр)

Мета роботи - з'ясувати молекулярні механізми виникнення точкових мутацій ДНК, спричинених одинарним перенесенням протону у Вотсон-Криківських парах основ ДНК, які відіграють чільну роль у мутагенезі, канцерогенезі і старінні. Методи дослідження - новітні квантово-хімічні методи на рівні теорії MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) як у вакуумному наближенні, так і в оточенні слабкої полярності, а також аналіз топології електронної густини за Бейдером. У результаті виконання проекту вперше встановлено нові фізико-хімічні механізми виникнення спонтанних точкових мутацій, спричинених мутагенною таутомеризацією шляхом одинарного перенесення протону у Вотсон-Криківських парах основ ДНК як у вільному стані, так і у слабкополярному оточенні, характерному для активного центру високоточної реплікативної ДНК-полімерази у складі реплісоми. Отримані результати дозволяють з'ясувати на квантово-хімічному рівні причини асиметрії точкових мутацій, зробити належну квантово-хімічну інтерпретацію існуючих експериментальних даних та спланувати нові "прицільні" молекулярно-біологічні експерименти.

Реферат (англ)

Aim of the investigation - to elucidate the molecular mechanisms of the DNA point mutations caused by the single proton transfer in Watson-Crick DNA base pairs, which play a major role in the mutagenesis, carcinogenesis and aging. Methods of investigation - novel quantum chemical methods at the MP2/6-311++G(2df,pd)//B3LYP/6-311++G(d,p) level of theory both in vacuum approximation and in the surrounding environment with low polarity, and also the Bader's topological analysis of the electron density. As a result of the project implementation for the first time it was established new physico-chemical mechanisms of the spontaneous point mutations caused by the mutagenic tautomerisation via the single proton transfer in Watson-Crick DNA base pairs both in the isolated state and in slightly polar environment typical for the active center of the high-fidelity replicative DNA polymerase as the part of replisome. Obtained results allow clarify at the quantum-chemical level the reasons for asymmetry of point mutations, perform appropriate quantum-chemical interpretation of the existing experimental data and plan new "aiming" molecular biological experiments.

Індекс УДК: 577.32, 577.3+577.32+577.338

Коди тематичних рубрик НТІ: 34.17.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Фізико-хімічні механізми мутагенної таутомеризації Вотсон-Криківських пар основ ДНК одинарним перенесенням протону як у вільному стані, так і у слабкополярному оточенні, характерному для активного центру високоточної реплікативної ДНК-полімерази у складі реплісоми.

Назва продукції (англ): Physico-chemical mechanisms of the mutagenic tautomerisation of the Watson-Crick DNA base pairs via single proton transfer both in the isolated state and in the slightly polar environment characteristic for the active center of

the highly replicative DNA polymerase as part of replisome.

Очікувані результати:

Галузь застосування: медицина

Опис продукції (укр): Вперше з'ясовано нові фізико-хімічні явища та закономірності у галузях, що стосуються молекулярної та структурної біології і торкаються молекулярних механізмів виникнення точкових мутацій, спричинених мутагенною таутомеризацією шляхом одинарного перенесення протону у Вотсон-Криківських парах основ ДНК як у вільному стані, так і у слабкополярному оточенні, характерному для активного центру високоточної реплікативної ДНК-полімерази у складі реплісоми. Встановлено на квантово-хімічному рівні причини асиметрії спонтанних точкових мутацій, що в свою чергу відкриває нові перспективи глибшого проникнення у процеси, що детермінують точність репарації цих пошкоджень відповідними ферментами.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: -

Виробник продукції: ІМБіГ НАН України

Споживачі продукції: Профільні НДІ

Перспективні ринки: Україна, СНД, ЄС

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

6 статей у міжнародних фахових журналах із сумарним імпакт-фактором 19,0.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 53

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Броварець Ольга Олександрівна

Говорун Дмитро Миколайович

Горб Леонід Григорович

Керівник організації:

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

Керівники роботи:

Броварець Ольга Олександрівна

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.