

Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0212U006461

Державний реєстраційний номер: 0112U001644

Відкрита

Дата реєстрації: 10-04-2012



1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: МОЛЕКУЛЯРНІ МОДЕЛІ КОМПЛЕКСІВ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ РЕЧОВИН З НУКЛЕЇНОВИМИ КИСЛОТАМИ ЗА УМОВАМИ МУЛЬТИМОДАЛЬНОГО ТА КОНКУРЕНТНОГО ЗВ'ЯЗУВАННЯ

Початок етапу: 01-2007

Закінчення етапу: 12-2011

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я.Усикова НАН України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03534593

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: 61085, м. Харків, вул. Ак.Проскури,12

Телефон: (057)7203337

Телефон: (057)3152105

E-mail: ire@ire.kharkov.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442350981

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: <http://nas.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: 6541030

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 1260.3 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Молекулярні моделі комплексів біологічно активних речовин з нуклеїновими кислотами за умовами мультимодального та конкурентного зв'язування (шифр „МОДЕЛЬ”)

Назва роботи (англ)

The molecular models of the complexes of biological compounds with nucleic acids at multimodal and competitive binding

Реферат (укр)

Головна ціль НДР "Модель" - розробка молекулярних моделей комплексів біологічно активних речовин (БАР) з нуклеїновими кислотами на основі дослідження фізичних параметрів комплексоутворення в умовах мультимодального та конкурентного зв'язування БАР із метою прогнозування на молекулярному рівні їх біологічної активності. Дослідження виконано за допомогою спектрофотометрії, флюоресцентної та коливальної спектроскопії, диференціальної сканувальної калориметрії (ДСК), НВЧ діелектрометрії, комп'ютерного моделювання з використанням полінуклеотидів та ДНК і БАР (протипухлинні антибіотики та їх новосинтезовані аналоги, мутагени, вітаміни). Отримана нова інформація щодо типів і структур комплексів ДНК - ліганд і їх термодинамічних характеристик в умовах мультимодального і конкурентного зв'язування з урахуванням водного оточення. Запропонована нова методика розрахунку параметрів зв'язування лігандів з ДНК за даними ДСК. Розроблено та запатентовано спосіб визначення впливу різних речовин на структуру ДНК, який дозволяє виконувати попередню оцінку рівня мутагенності БАР. Створено Інтернет-базу даних ProtNA-ASA (www.protna.bio-page.org), яка містить систематизовану інформацію щодо конформаційних параметрів і площин доступної поверхні атомів нуклеїнових кислот у складі білково-нуклеїнових комплексів.

Реферат (англ)

The main purpose of the research "Model" is a development of molecular models of complexes of biologically active substances (BAS) with nucleic acids in order to predict their biological activity at the molecular level. The development is based on the study of the physical parameters of complex formation in a multimodal and competitive binding of biologically active substances. The research was carried out by spectrophotometry, fluorescence and vibrational spectroscopy, differential scanning calorimetry (DSC), EHF dielectrometry, and computer simulation using the polynucleotides, DNA and biologically active substances (antitumor antibiotics and their newly synthesized analogues, mutagenes, and vitamins). New information on the types and structures of DNA - ligand complexes and their thermodynamic characteristics in multimodal and competitive binding taking into account the water environment was obtained. A new technique for calculating the parameters of ligand binding to the DNA according to the DSC was developed. The method for determining the effect of various substances on the structure of DNA was developed and patented. It allows to perform a preliminary assessment of the level of BAS mutagenicity. Online database ProtNA-ASA (www.protna.bio-page.org) was created. It provides systematic information about the conformational parameters and areas of accessible surface of atoms of nucleic acids in the protein-nucleic acid complexes.

Індекс УДК: 573.6:007].004.14, 577.32

Коди тематичних рубрик НТІ: 34.53.53

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Молекулярні моделі комплексів біологічно активних речовин з нуклеїновими кислотами за умовами мультимодального та конкурентного зв'язування

Назва продукції (англ): The molecular models of the complexes of biological compounds with nucleic acids at multimodal and

competitive binding

Очікувані результати:

Галузь застосування: 73.10

Опис продукції (укр): Нова методика розрахунку з даних диференційної скануючої калориметрії параметрів зв'язування лігандів з ДНК, перевага якої полягає у тому, що розрахунки виконується у випадках, коли неможливо використання спектроскопічних методів. Розроблено і запатентовано спосіб визначення впливу різних сполук на структуру ДНК, який може використовуватися для попередньої оцінки рівня мутагенності біологічно активних речовин in vitro. Створено базу даних ProtNA-ASA, яка доступна в Інтернеті (www.protna.bio-page.org) і містить систематизовану інформацію щодо конформаційних параметрів і площин доступної поверхні атомів нуклеїнових кислот у складі білково-нуклеїнових комплексів.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 2012-2015

Виробник продукції: ІРЕ ім. О.Я. Усикова НАН України

Споживачі продукції: науково-дослідні установи, розробники нових біологічно активних речовин

Перспективні ринки: науково-дослідні установи, розробники нових біологічно активних речовин

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

Круглова Е. Б. Необычные формы изотерм адсорбции в трехкомпонентных системах / Е. Б. Круглова // Биофизика. - 2007. - Т. 52. - Вып. 5. - С. 822-824.; Березняк Е. Г. Взаимодействие производного актиноцина с различными структурами poly(rC) / Е. Г. Березняк, Е. Б. Круглова, А. С. Хребтова и др. // Биофизика. - 2007. - Т. 52. - Вып. 5. - С. 812-821.; Гладковская Н. А. Анализ взаимодействия биологически активных лигандов с нуклеиновыми кислотами / Н. А. Гладковская // Біофізичний вісник. - 2007. - Вып. 19. -? С. 55-64.; Ермак Е. Л. Связывание теофиллина с тимусной ДНК в присутствии конкурирующих лигандов / Е. Л. Ермак, Е. Б. Круглова // Біофізичний вісник. - 2007. - Вып. 19. - С. 13-19.; Ермак Е. Л.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 350

Мова звіту: Російська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Березняк Катерина Германівна

Больбух Том Вікторович

Гасан Анатолій Йосипович

Кашпур Всеволод Андрійович

Круглова Олена Борисівна

Малеев Володимир Якович

Семенов Михайло Олексійович

Керівник організації:

Яковенко Володимир Мефодійович

Керівники роботи:

Шестопалова Ганна Вікторівна

**Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ**



Юрченко Т.А.