

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000777

Державний реєстраційний номер: 0121U111199

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Оцінка стабільності комплексів «С60-протеїн» та їх енергетичних параметрів, дизайн комплексів «С60 нанокластер-протеїн», приготування і характеризування С60 ВРФ. Визначення ефективності віруліцидної та протикоронавірусної дії С60ВРФ in vitro у різних схемах застосування. Оцінка стабільності комплексів «С60 нанокластер-протеїн» та їх енергетичних параметрів, проникності С60 фулерену крізь ліпопротеїнову оболонку коронавіруса, приготування та характеризування С60 ВРФ. Оцінка безпечності застосування зразків С60 ВРФ in vivo. Визначення протикоронавірусної ефективності С60 ВРФ in vivo у різних схемах застосування.

Початок етапу: 05.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393333

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний науково-контрольний інститут біотехнології і штамів мікроорганізмів

Код за ЄДРПОУ: 19024865

Місцезнаходження: вул. Донецька, буд. 30, м. Київ, 03151, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Державна служба України з питань безпечності харчових продуктів та захисту споживачів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442457608, 380442457684

Внесок співвиконавця у звітний етап:

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622, 380442981622

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

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

Напрямок фінансування: 2.1 – фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 1809.805

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Протикоронавірусна активність водорозчинних C60 фулеренів у створенні нових прототипів профілактичних і терапевтичних препаратів: *in silico*, *in vitro* та *in vivo* скринінги

Назва роботи англійською:

Anticoronaviral activity of water-soluble C60 fullerenes in the creation of new prototypes of prophylactic and therapeutic drugs: *in silico*, *in vitro* and *in vivo* screenings

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – взаємодія C60 фулерену з протеїнами-мішенями у складі коронавірусу SARS-CoV-2 (RdRp та 3CLpro) та рецепторним білком ACE2. Мета роботи – з'ясування протикоронавірусної активності C60 фулерену. Методи дослідження – сканувальна електронна мікроскопія, сканувальна тунельна мікроскопія, атомно-силова мікроскопія, динамічне розсіяння світла, молекулярна динаміка, молекулярний докінг. Приготовлено та охарактеризовано водний розчин C60 фулеренів (C60ВРФ) за використання оригінальної ультразвукової технології, мікроскопічних (СЕМ, СТМ, АСМ) та спектроскопічного (ДРС) методів. Так, результати ДРС засвідчили, що свіжоприготовлений C60ВРФ (концентрація 0,15 мг/мл) є типовим колоїдним розчином, у якому переважно містяться сферичні наночастинки з гідродинамічним діаметром ~50 нм. Значення дзета-потенціалу для C60ВРФ складало -27,0 мВ, що свідчить про його високу стабільність. Здійснено літературний пошук та відібрано активні протеїни-мішені у складі коронавірусу SARS-CoV-2 (RdRp та 3CLpro) та чутливих до них клітин різних органів (ACE2), здатних зв'язуватися із C60 фулереном. Здійснено дизайн потенційних комплексів «C60-протеїн» в імітованому клітинному середовищі за використання методів молекулярної динаміки (МД) і докінгу. Показано, що C60 фулерен може утворювати стабільний комплекс з білком 3CLpro і, таким чином, пригнічувати функціональну активність SARS-CoV-2. Відповідно до результатів молекулярного докінгу C60 фулерен повністю заповнює відібрані сайти зв'язування протеїну RdRp. За результатами МД ключові взаємодії з RdRp зберігаються для усіх сайтів зв'язування. Для протеїнів 3CLpro і RdRp оцінено енергії зв'язування із C60 фулереном за використання методів MMPBSA та MMGBSA. Здійснено дизайн потенційних нанокластерів C60 фулерену у воді та проаналізовано їх здатність таргетувати протеїни RdRp та 3CLpro і, таким чином, пригнічувати функціональну активність коронавірусу SARS-CoV-2.

Реферат англійською:

The object of the study is the interaction of C60 fullerene with target proteins in the SARS-CoV-2 coronavirus (RdRp and 3CLpro) and ACE2 receptor protein. The aim of the study is to determine the anticoronaviral activity of C60 fullerene. Research methods: scanning electron microscopy, scanning tunneling microscopy, atomic force microscopy, dynamic light scattering, molecular dynamics, molecular docking. An aqueous solution of C60 fullerenes (C60FAS) was prepared and characterized using original ultrasonic technology, microscopic (SEM, STM, AFM) and spectroscopic (DLS) methods. So, the DLS results showed that freshly prepared C60FAS (concentration 0.15 mg/ml) is a typical colloidal solution, which mainly contains spherical nanoparticles with a hydrodynamic diameter ~50 nm. The value of the zeta potential for C60FAS was -27.0 mV, which indicates its high stability. A literature search was performed and active target proteins in the SARS-CoV-2 coronavirus (RdRp and 3CLpro) and sensitive cells of various organs (ACE2) capable of binding to C60 fullerene were selected. The design of potential "C60-protein" complexes in a simulated cellular medium was performed using the molecular dynamics (MD) and docking methods. It has been shown that C60 fullerenes can form a stable complex with the 3CLpro protein and thus inhibit the functional activity of SARS-CoV-2. According to the molecular docking results, C60 fullerene completely fills the selected binding sites of the RdRp protein. According to the MD results, key interactions with RdRp are retained for all binding sites. For 3CLpro and RdRp proteins, the binding energy to C60 fullerene was

estimated using MMPBSA and MMGBSA methods. The design of potential C60 fullerene nanoclusters in water was performed and their ability to target RdRp and 3Clpro proteins and thus inhibit the functional activity of SARS-CoV-2 coronavirus was analyzed.

Індекс УДК: 576.3:616-022.7

Коди тематичних рубрик: 34.19.26

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Прилуцький Юрій Іванович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Гурмач Василь Васильович
(к. б. н., 03.00.02, 03.00.03)

Завальний Дмитро Костянтинівич

Платонов Максим Олегович
(к. б. н.)

Прилуцька Світлана Володимирівна
(к. б. н.)

Черепанов Всеволод Володимирович
(к. ф.-м. н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Катасонова В.В.

Телефон

+38 (044) 239-31-88

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

