

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U000646

Державний реєстраційний номер: 0121U111116

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-01-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Комп'ютерне моделювання властивостей ліпідних мембран. Дослідження властивостей ліпідних мембран, що містять транс-мембранний білок ACE2. Дослідження зміни властивостей ліпідних мембран при взаємодії з вірусним патогеном SARS-CoV-2. Визначення маркерів наявності вірусної інфекції.

Початок етапу: 04.2021

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

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

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.): 2606.717

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив структури та фізичних властивостей ліпідної мембрани на розвиток вірусної інфекції

Назва роботи англійською:

Influence of structure and physical properties of lipid membrane on development of viral infection

Реферат українською:

Об'єкт дослідження: структура та властивості ліпідних мембран Мета роботи: виявлення особливостей структури та динамічних характеристик ліпідної мембрани під час взаємодії з вірусним патогеном Методи дослідження: малокутове розсіяння нейтронів, коливальна спектроскопія, молекулярна динаміка Методом молекулярної динаміки проведено комп'ютерне моделювання впливу домішок (мелатонін, холестерин, білкові молекули) на структурні властивості модельної ліпідної мембрани на основі диміристоїлфосфатидилхоліну (ДМФХ). Оцінено залежність структурних параметрів модельної ліпідної мембрани, утвореної подвійним шаром молекул ДМФХ, у складі водної рідинної системи від вмісту домішок. Досліджено вплив S-протеїну («шипа») коронавірусу SARS-CoV-2 на структурні параметри модельної ліпідної мембрани на модельних системах на основі ДМФХ з домішками холестерину або мелатоніну в різних концентраціях. Проведено експериментальне дослідження структурних особливостей взаємодії білкових молекул з модельними ліпідними мембранами методами малокутового розсіяння нейтронів та коливальної спектроскопії. Порівнювались структурні параметри наступних систем: водний розчин ДМФХ без домішок, розчин ДМФХ з додаванням білкових молекул (RBD SARS-CoV-2), розчини ДМФХ до додаванням 15% та 30% мелатоніну або холестерину, системи ДМФХ + 30% мелатоніну або холестерину + RBD SARS-CoV-2. Показано, що збільшення концентрації мелатоніну в ліпідній мембрані призводить до зменшення товщини ліпідного бішару, а збільшення концентрації холестерину, навпаки, призводить до збільшення товщини ліпідного бішару незалежно від фазового стану ліпідної системи. Виявлено також, що взаємодія активної частини S-протеїну відбувається навіть при відсутності в модельній системі трансмембранного білка ACE2, тобто саме з головними частинами мембрани.

Реферат англійською:

Research object: structure and properties of lipid membranes Purpose of work: detection of structural features and dynamic characteristics of lipid membrane during interaction with viral pathogen Research methods: small angle neutron scattering, vibrational spectroscopy, molecular dynamics Molecular dynamics computer simulation of the effect of impurities (melatonin, cholesterol, protein molecules) on the structural properties of the model lipid membrane based on dimyristoylphosphatidylcholine (DMPC) was performed. The dependence of the structural parameters of the model lipid membrane formed by the double layer of DMPC molecules in the aqueous liquid system on the content of impurities was estimated. The effect of SARS-CoV-2 coronavirus S-protein ("thorn") on the structural parameters of the model lipid membrane on model systems based on DMPC with impurities of cholesterol or melatonin in different concentrations was studied. An experimental study of the structural features of the interaction of protein molecules with model lipid membranes by small angle neutron scattering and vibrational spectroscopy was performed. The structural parameters of the following systems were compared: aqueous DMPC solution without impurities, DMPC solution with the addition of protein molecules (RBD SARS-CoV-2), DMPC solutions with the addition of 15% and 30% melatonin or cholesterol, DMPC + 30% melatonin or cholesterol + RBD SARS-CoV-2. It is shown that an increase in the concentration of melatonin in the lipid membrane leads to a decrease in the thickness of the lipid bilayer, and an increase in the concentration of cholesterol, in contrast, leads to an increase in the thickness of the lipid bilayer regardless of the phase state of the lipid system. It was also found that the interaction of the active part of the S-protein occurs even in the absence of the ACE2 transmembrane protein in the model system, i.e. with the main parts of the membrane.

Індекс УДК:53.09

Коди тематичних рубрик: 29.03.53

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Булавін Леонід Анатолійович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Експериментальне дослідження структурних особливостей взаємодії білкових молекул.

Назва НТП англійською: Experimental study of the structural features of the interaction of protein molecules.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Маркери, пов'язані із структурними та динамічними властивостями ліпідної мембрани

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проведено експериментальне дослідження структурних особливостей взаємодії білкових молекул з модельними ліпідними мембранами методами малокутового розсіювання нейтронів та коливальної спектроскопії. Порівнювались структурні параметри наступних систем: водний розчин ДМФХ без домішок, розчин ДМФХ з додаванням білкових молекул (RBD SARS-CoV-2), розчини ДМФХ до додаванням 15% та 30% мелатоніну або холестерину, системи ДМФХ + 30% мелатоніну або холестерину + RBD SARS-CoV-2. Показано, що збільшення концентрації мелатоніну в ліпідній мембрані призводить до зменшення товщини ліпідного бішару, а збільшення концентрації холестерину, навпаки, призводить до збільшення товщини ліпідного бішару незалежно від фазового стану ліпідної системи. Виявлено також, що взаємодія активної частини S-протеїну відбувається навіть при відсутності в модельній системі трансмембранного білка ACE2, тобто саме з головними частинами мембрани. Зроблено припущення, що збільшення концентрації мелатоніну в мембрані запобігає взаємодії коронавірусного S-протеїну з ліпідною мембраною. За присутності домішок холестерину в системі взаємодія ліпідної мембрани з активною частиною S-протеїну відбувається залежно від фазового стану ліпиду.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна

д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Іваньков Олександр Ігорович

(к. ф.-м. н., 01.04.14)

Іляш Валентина Михайлівна

Дорошенко Ірина Юріївна

(д. ф.-м. н., 01.04.14)

Ніколаєнко Тимофій Юрійович

(д. ф.-м. н.)

Соловійов Дмитро Володимирович

(д. 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**

