Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U001040

Державний реєстраційний номер: 0114U006522

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-01-2015

II. Етап виконання ДіР

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

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (044) 526-5589

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код за ЄДРПОУ: 00027677

Місцезнаходження: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0442048428

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)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2209020

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 60

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

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

Назва роботи англійською:

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

Реферат українською:

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 англійською:

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: 34.17.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Броварець Ольга Олександрівна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: 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 НТП англійською: 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.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: медицина

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: 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:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: -

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Профільні НДІ

Перспективні ринки: Україна, СНД, ЄС

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

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

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Єльська Ганна Валентинівна

д. б. н.

Перелік осіб-виконавців

Броварець Ольга Олександрівна

Говорун Дмитро Миколайович

Горб Леонід Григорович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

