

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0226U004543

Державний реєстраційний номер: 0126U004259

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-09-2026

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Вивчити in silico особливості переносу протону від тиміну до аденіну у міні-спіралі, яка має будову dA5·dT5 Дослідити in silico та in vivo взаємодію кварцетину, лютеоліну, апігеніну та їх алкілованих похідних з вірусними мішенями, такими як: helicase, papilloma virus, helicase HCV, PB2 influenza та нейрамінідаза вірусу грипу. Виявити закономірності структура-функція. Вивчити in silico первинну та вторинну структури сайту геномної РНК ВІЛ-1, яка регулює процес стабілізації мРНК.

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження: вул. Академіка Заболотного, Київ, 03143, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442000356, 380445261169

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01601, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - Договір (замовлення) з міністерством, іншим центральним органом виконавчої влади, академією наук (головним розпорядником бюджетних коштів на проведення ДіР)

Напрямок фінансування: 2.1 - Фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - Кошти загального фонду державного бюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 4599.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Динамічна структура нуклеїнових кислот і механізми їх взаємодії з біологічно активними речовинами

Назва роботи англійською:

Dynamic structure of nucleic acids and the mechanisms of their interactions with biologically active substances

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – структура нуклеїнових кислот і механізми їх взаємодії з біологічно активними речовинами. Мета роботи Вивчити *in silico* особливості переносу протону від тиміну до аденіну у міні-спіралі, яка має будову dA5·dT5 Дослідити *in silico* та *in vivo* взаємодію кверцетину, лутеолину, апигеніну та їх алкілованих похідних з вірусними мішенями, такими як: helicase, papilloma virus, helicase HCV, PB2 influenza та нейрамінідаза вірусу грипу. Виявити закономірності структура-функція. Вивчити *in silico* первинну та вторинну структури сайту геномної РНК ВІЛ-1, яка регулює процес стабілізації мРНК. Методи дослідження Програмний пакет для моделювання Gaussian 16, програмний пакета 3DNA, бази даних NCBI (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>) та HIV sequence database of Los Alamos National Laboratory, (<http://www.hiv.lanl.gov/>), програма UNAFold. Результати Сучасні уявлення про динамічну структуру нуклеїнових кислот розширені першими теоретичними даними про механізм таутомеризації АТ пари у міні-спіралі ДНК d(A)5·d(T)5, яка мала В-форму, а також даними про вторинну структуру С-багатих трактів приблизно 5000 геномів ВІЛ-1 різних субтипів. Експериментально і розрахунково показана здатність кверцетину, лутеолину, апигеніну взаємодіяти з вірусними мішенями PB2 (домен вірусної полімерази грипу) і NS3 гелікази (домен HPV – Human Papillomavirus).

Реферат англійською:

The object of research is the structure of nucleic acids and the mechanisms of their interaction with biologically active substances. Purpose of the work To study *in silico* the features of proton transfer from thymine to adenine in a mini-helix, which has the structure dA5·dT5 To study *in silico* and *in vivo* the interaction of quercetin, luteolin, apigenin and their alkylated derivatives with viral targets, such as: helicase, papilloma virus, helicase HCV, PB2 influenza and influenza virus neuraminidase. To identify structure-function patterns. To study *in silico* the primary and secondary structures of the site of genomic RNA of HIV-1, which regulates the process of mRNA stabilization. Research methods The Gaussian 16 modeling package, the 3DNA software package, the NCBI databases (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>) and the HIV sequence database of Los Alamos National Laboratory, (<http://www.hiv.lanl.gov/>), the UNAFold program. Results Modern ideas about the dynamic structure of nucleic acids are expanded by the first theoretical data on the mechanism of tautomerization of the AT pair in the DNA mini-helix d(A)5·d(T)5, which had a B-form, as well as data on the secondary structure of C-rich tracts of approximately 5000 HIV-1 genomes of different subtypes. The ability of quercetin, luteolin, apigenin to interact with viral targets PB2 (influenza viral polymerase domain) and NS3 helicase (HPV – Human Papillomavirus domain) has been experimentally and computationally demonstrated.

Індекс УДК: 577.2, 577.32, 577.323+577.324+578.2

Коди тематичних рубрик: 34.15, 34.17.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Горб Леонід Григорович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Звіт (проміжний) про науково-дослідну роботу 2.2.4.11 «Динамічна структура нуклеїнових кислот і механізми їх взаємодії з біологічно активними речовинами»

Назва НТП англійською: Report (interim) on research work 2.2.4.11 «Dynamic structure of nucleic acids and mechanisms of their interaction with biologically active substances»

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези, Аналітичні матеріали

Галузь застосування: медицина, молекулярна біологія

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Проведено дослідження однопротонного і двухпротонного шляхів таутомерізації у парі аденін – тімін (АТ). In silico досліджено взаємодію кверцетину, лютеоліну, апігеніну. In silico досліджено первинну та вторинну структури сайту геномної РНК ВІЛ-1, яка регулює процес стабілізації мРНК.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Інше (Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави)

Вплив НТП на довкілля: Не впливає

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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:

IX. Бібліографічний опис

<https://doi.org/10.1016/j.saa.2022.122065>

<https://doi.org/10.1016/j.virusres.2022.198910>

<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c04153>

<https://doi.org/10.21203/rs.3.rs-1219356/v1>

<https://doi.org/10.1007/s11224-022-01923-1>

<https://doi.org/10.1080/00268976.2022.2053218>

<https://doi.org/10.1080/07391102.2022.2053746>

<https://doi.org/10.1016/j.cocom.2022.e00762>

<https://doi.org/10.1016/j.tsf.2022.139349>

<https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2021.121315>

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Тукало Михайло Арсентійович
д. б. н., професор, академік НАНУ, 03.00.03

Перелік осіб-виконавців

Войтешенко Іван Сергійович

(к. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 03.00.02, 03.00.03)

Гурмач Василь Васильович

(к. б. н., н.с, 03.00.02, 03.00.03)

Зарудна Маргарита Іванівна

(д. б. н., пров.н.с., 03.00.02, 03.00.03)

Пальчиковська Лариса Гнатівна

(к. х. н., старший науковий співробітник)

Платонов Максим Олегович

(к. б. н., старший науковий співробітник, 03.00.02, 03.00.03)

Степанюгін Андрій Васильович

(молодший науковий співробітник)

Ширина Тетяна Володимирівна

(к. б. н., н.с, 03.00.02, 03.00.03)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Санченко Ольга Миколаївна

Телефон

+380442000326

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна