Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U104792

Державний реєстраційний номер: 0115U003746

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-04-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Фізико-хімічні механізми спонтанних та індукованих аналогами нуклеотидних основ точкових мутацій

Початок етапу: 01.2016

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Остаточний 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, буд. 150, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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, буд. 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Президія Національної академії наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 7056.200

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Фізико-хімічні механізми спонтанних та індукованих аналогами нуклеотидних основ точкових мутацій

Назва роботи англійською:

Physico-chemical mechanisms of the spontaneous and induced by analogues of nucleotide bases point mutations

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – фізико-хімічні механізми спонтанних та індукованих аналогами нуклеотидних основ точкових мутацій. Мета дослідження - дослідити елементарні фізико-хімічні механізми виникнення спонтанних та індукованих мутагенами – аналогами основ ДНК точкових мутацій та встановити роль, яку відіграє у цих процесах кишеня впізнавання високоточної ДНК-полімерази. Методи досліджень – використано арсенал методів обчислювальної біології (неемпіричні та напівемпіричні квантово-хімічні підходи, гібридні квантово-механічні/молекулярно-механічні методи, молекулярна механіка та динаміка, докінг, зокрема гнучкий) та структурної біоінформатики, а також методи фізико-хімічної кінетики та топологічного аналізу електронної густини за Бейдером. Отримані результати – створено та обґрунтовано внутрішньо не протиречиву теорію спонтанного та індукованого модифікованими нуклеотидними основами точкового мутагенезу. Розроблено квантово-хімічний алгоритм скринінгу високоефективних мутагенів та антимутагенів – похідних нуклеотидних основ – із адресною дією, здатних спричинити або помилки включення, або реплікації, або ті й інші разом. Висновки – вперше отримано і представлено низку результатів, щодо органічного об'єднання таутомерної гіпотези із поглядами, які вважають причину цих процесів в утворенні неправильних пар основ ДНК у канонічній таутомерній формі.

Реферат англійською:

The object of research – is the physicochemical mechanisms of spontaneous and analogue-induced nucleotide bases of point mutations. The purpose of the study – is to investigate the elementary physicochemical mechanisms of spontaneous and mutagenic - induced analogues of DNA bases of point mutations and to establish the role played in these processes by the pocket of recognition of high-precision DNA polymerase. Research methods – used an arsenal of methods of computational biology (non-empirical and semi-empirical quantum-chemical approaches, hybrid quantum-mechanical / molecular-mechanical methods, molecular mechanics and dynamics, docking, including flexible) and structural bioinformatics, as well as physical methods of physics and chemistry analysis of electron density by Bader. The obtained results – the internally contradictory theory of spontaneous and induced by modified nucleotide bases point mutagenesis is created and substantiated. A quantum chemical screening algorithm for highly effective mutagens and antimutagens – derivatives of nucleotide bases – with targeted action, capable of causing either inclusion or replication errors, or both, has been developed. Conclusions - for the first time a number of results have been obtained and presented on the organic combination of the tautomeric hypothesis with views that consider the cause of these processes in the formation of incorrect pairs of DNA bases in the canonical tautomeric form.

Індекс УДК: 577.3, 577.3+577.32+577.338

Коди тематичних рубрик: 34.17.39

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Говорун Дмитро Миколайович

Науковий ступінь: д. б. н.

Вчене звання: член-кор.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Фізико-хімічні механізми спонтанних та індукованих аналогами нуклеотидних основ точкових мутацій

Назва НТП англійською: Physico-chemical mechanisms of spontaneous and induced analogues nucleotide bases of point mutations

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: наукові установи

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Звіт із завершеної теми

Соціально-економічна спрямованість НТП: дослідження елементарних фізико-хімічних механізмів виникнення спонтанних та індукованих мутагенами – аналогами основ ДНК точкових мутацій

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 01.2016
- **Закінчення етапу:** 12.2020

Споживачі продукції: Наукові установи

Перспективні ринки: Наукові установи

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:**

Назва НТП українською: Фізико-хімічні механізми спонтанних та індукованих аналогами нуклеотидних основ точкових мутацій

Назва НТП англійською: Physico-chemical mechanisms of spontaneous and analogue-induced nucleotide bases of point mutations

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування:Наукові заклади

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Заключний звіт

Соціально-економічна спрямованість НТП: Фундаментальні наукові дослідження

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 01.2016
- **Закінчення етапу:** 12.2020

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 обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

IX. Бібліографічний опис

Всього за час виконання НДР за темою досліджень опубліковано 58 наукових статей (у т.ч. 5 (п’ять) в Україні та 53 за кордоном) і 32 тез доповідей наукових конференцій та з’їздів.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Тукало Михайло Арсентійович
д. б. н., 03.00.03

Перелік осіб-виконавців

Броварець Ольга Олександрівна

Горб Леонід Григорович

Зарудна Маргарита Іванівна

Коломієць Ірина Миколаївна
(к. б. н.)

Пальчиковська Лариса Гнатівна
(к. х. н., 02.00.01)

Платонов Максим Олегович

Потягайло Андрій Любомирович

Самійленко Світлана Панасівна
(к.ф.-м.н., 01.04.05)

Степанюгін Андрій Васильович
(молодший науковий співробітник)

Ширина Тетяна Володимирівна

Відповідальний за підготовку облікових документів Ширина Т.В.

Телефон +38 (097) 193-57-41

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності