

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U001727

Державний реєстраційний номер: 0119U100688

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Дослідження ефектів впливу резонансу електромагнітного випромінювання на біологічну активність уреаз та її комплексів з інгібіторами

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державна установа "Інститут мікробіології та імунології ім. І. І. Мечникова Національної академії медичних наук України"

Код за ЄДРПОУ: 02012208

Місцезнаходження: вул. Пушкінська, 14-16, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61057, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія медичних наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 0577313151, 0577314184

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 00061125

Місцезнаходження: вул. Герцена, 12, м. Київ, Київська обл., 04050, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 390444893981

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір з МОН, іншими центральними органами виконавчої влади

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6561040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2348.600

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Дослідження ефектів впливу резонансу електромагнітного випромінювання на біологічну активність уреаз та її комплексів з інгібіторами

Назва роботи англійською:

Investigation of the effects of electromagnetic resonance on the biological activity of urease and its complexes with inhibitors

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - просторова структура активного сайту уреаз та їх комплексу з інгібітором, уреаз та НВЧ-діелектрометр в умовах електронного парамагнітного резонансу. Мета роботи - визначення характеру та механізмів гальмування або активації мікробної уреаз резонансними електромагнітними хвилями в гіга- та терагерцевому діапазонах. Методи дослідження - методи молекулярного моделювання: мінімізація молекулярної структури, молекулярна динаміка, методи ЕПР-спектроскопії в умовах електронного парамагнітного резонансу, біохімія ферментативного каталізу. Досліджені роль атомів нікелю в активному центрі уреаз, вплив температури і типу катіону на структуру активного центру уреаз. Показано, що зв'язування конкурентного інгібітору (ацетогідроксамової кислоти, АНА) не змінює координацію іонів нікелю в активному сайті холоферменту уреаз і суттєво не впливає на геометрію активного сайту поблизу іонів нікелю. Головним фактором зв'язування інгібітору є іони нікелю. Залишки активного сайту складають лише сайт впізнавання субстрату. Показано, що найближче оточення навколо активних сайтів Ni-вмісних і Mn-вмісних уреаз *Klebsiella aerogenes* та *Sporosarcina pasteurii* приблизно ідентичне. Показано, що структура металоцентру цих уреаз є в цілому стабільною незалежно від походження уреаз, типу катіону та температури. Одержані результати добре узгоджуються з літературними даними сучасних експериментальних та розрахункових досліджень структури металоцентрів уреаз і сприятимуть розробці методів селективного гальмування активності уреаз різноманітними інгібіторами та селективними фізичними чинниками (резонансним електромагнітним випромінюванням). Спроектовано та створено декілька зразків комірок для діелектрометра, в яких можна дослідити поглинання розчинів уреаз в умовах електронного парамагнітного резонансу - з використанням однополюсного магнітного уловлювача.

Реферат англійською:

The object of research is the spatial structure of the active site of the urease and their complex with an inhibitor, urease and microwave-dielectrometer in an electronic paramagnetic resonance. The purpose of the work is to determine the nature and mechanisms of inhibition or activation of microbial ureases by resonant electromagnetic waves in the giga and terahertz. Methods of research - Methods of molecular modeling: minimization of molecular structure, molecular dynamics, methods of EPR spectroscopy in an electronic paramagnetic resonance, biochemistry of enzymatic catalysis. The role of nickel atoms in the active urease center, the influence of temperature and type of cation on the structure of the active center of urease is investigated. It has been shown that the binding of a competitive inhibitor (acetohydroxy-acid, AHA) does not change the coordination of nickel ions in the active site of the idle of urease and significantly affects the geometry of the active site near Nickel ions. The main factor in the binding of the inhibitor are nickel ions. The remains of the active site are only a substrate recognition site. It is shown that the nearest environment around active Ni-containing sites and Mn-containing Ureases *Klebsiella Aerogenes* and *Sporosarcina Pasteurii* is approximately identical. It is shown that the structure of the metal center of these Ureases is generally stable, regardless of the origin of ureases, type of cation and temperature. The obtained results are well consistent with literary data of modern experimental and settlement studies of the structure of the Urease metal centers and will contribute to the development of methods of selective inhibition of urease activity by various inhibitors and selective physical factors (resonant electromagnetic

radiation). Several cell samples for a dielectrometer are designed and created, in which you can investigate the absorption of urease solutions in an electronic paramagnetic resonance - using a single-pole

Індекс УДК: 615.281:577.1, 615.28:579.873.2:615.363

Коди тематичних рубрик: 31.27.22

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Мартинов Артур Вікторович

Науковий ступінь: д. фармац. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Спосіб дослідження поглинання розчинів уреазі в умовах електронного парамагнітного резонансу з використанням однополюсного магнітного уловлювача

Назва НТП англійською: Method of studying absorption of urease solutions in electronic paramagnetic resonance conditions using unipolar magnetic trap

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Технології

Галузь застосування: Розробка методів селективного гальмування активності уреазі різноманітними інгібіторами та селективними фізичними чинниками

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Спроековано та створено декілька зразків комірок для діелектрометра, в яких можна дослідити поглинання розчинів уреазі в умовах електронного парамагнітного резонансу – з використанням однополюсного магнітного уловлювача. Показано, що для модельних розчинів спирту та магнія сульфату спостерігається залежність між зсувом фази хвилі та концентрацією діючої речовини. Показано, що однополюсна комірка-уловлювач значно впливає на фазу електромагнітної хвилі та на саму речовину. Також однополюсне магнітне поле в умовах електронного парамагнітного резонансу впливає на каталіз руйнування сечовини уреазою, а полюсність комірки має значення. Для полюсу північ (всередині комірки) спостерігається негативне зрушення фази хвилі, а для полюсу південь спостерігаються хаотичні зрушення смуги, а закономірності зрушення фази в динаміці гідролізу сечовини майже не спостерігається.

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

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: 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:

IX. Бібліографічний опис

Lisnyak Yu. V., Martynov A. V.. Molecular dynamics study of structural role of metal atoms in the urease active site. // Annals of Mechnikov's Institute. – 2020. – № 1. – P. 6-14

Eremenko Z. E., Pashynska V. A., Kuznetsova K. S., Martunov A. V. Development of experimental techniques for antibiotics detection in aqueous solutions: real-time microwave dielectrometry and UV-Vis spectrophotometry study. // Low Temperature Physics. – 2021. – vol. 47. – No. 12. – P. 1139-1147

Eremenko Z.E., Pashynska V.A., Kuznetsova K.S., Shubnyi O.I., Sklyar N.I., Martynov A.V. Microwave dielectrometer application to antibiotic concentration control in water solution. //Radiofiz. elektron. –2021. –V26 . – N3. – P. 30-37

Kuznetsova K. S., Pashynska V. A., Eremenko Z. E., Shubniy O. I., Martunov A. V. Permittivity characterization of aqueous solutions of biological active substances. II Intern. // Advanced Study Conf. Condensed Matter & Low Temperature Physics, Kharkiv, Ukraine (2021).

Eremenko Z. E., Kuznetsova K. S., Sklyar N. I., Martynov A. V. Measuring Complex Permittivity of High-Loss Liquids. Dielectric Materials and Applications, P. K. Choudhury (ed.), Nova Science Publisher (2019), Chapt. 2. (Monograph)

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Попов Микола Миколайович

д. мед. н., 14.03.08

Перелік осіб-виконавців

Єременко Зоя Єлівна

(д. ф.-м. н.)

Бомко Тетяна Василівна

(к.б.н., 14.03.05)

Лісняк Юрій Володимирович

Мануйлов Михайло Борисович

(к. т. н., 01.01.01)

Мартинів Артур Вікторович

(д.фарм.н., 15.00.02)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Крестецька С.Л.

Телефон

+38 (067) 161-20-78

Реєстратор

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

