

**Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
Національний технічний університет України
«КПІ ім. Ігоря Сікорського»,
Інститут магнетизму НАН України та МОН України,
Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних
технологій і систем НАН України та МОН України
Українське біофізичне товариство**

МАТЕРІАЛИ

**XV Міжнародної конференції з прикладної
біофізики, біоніки та біокібернетики**

Київ, 11 квітня 2024 р.

УДК 57.08;62-5;619:577

Матеріали XV Міжнародної конференції з прикладної біофізики, біоніки та біокібернетики, 11 квітня 2024 р., Київ, Україна. – Київ, 2024, - 48 стор.

Збірник тез конференції містить результати роботи дослідників України та іноземних вчених по біоніці та прикладній біофізиці. Збірник розрахований на наукових працівників, аспірантів та студентів.

За достовірність викладу даних та текст тез несуть відповідальність автори.

© Інститут магнетизму НАН України та МОН України, 2024 г.

© Київський національний університет імені Тараса Шевченка, 2024 г.

ОРГАНІЗАТОРИ КОНФЕРЕНЦІЇ

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка,
Національний технічний університет України «КПІ ім. Ігоря Сікорського»,
Інститут магнетизму НАН України та МОН України,
Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій і систем
НАН України та МОН України
Українське біофізичне товариство

ГОЛОВИ КОНФЕРЕНЦІЇ:

ГОРГО Ю.П. Д.Б.Н., ПРОФ., НТУУ «КПІ» ІМ. ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО, (КИЇВ).
НЕТРЕБА А.В. - К.Ф.-М.Н, ДОЦЕНТ, ДЕКАН ФАКУЛЬТЕТУ
РАДІОФІЗИКИ, ЕЛЕКТРОНІКИ ТА
КОМП'ЮТЕРНИХ СИСТЕМ КНУ ІМ. ТАРАСА ШЕВЧЕНКА, (КИЇВ).
ТОВСТОЛИТКІН О.І. - Д.Ф.-М.Н, ПРОФ., ДИРЕКТОР ІНСТИТУТ
МАГНЕТИЗМУ НАН ТА МОН УКРАЇНИ (КИЇВ).

ГОЛОВА ОРГКОМІТЕТУ:

МАМІЛОВ С.О. - К.Ф.-М.Н, С.Н.С., ІНСТИТУТ МАГНЕТИЗМУ НАН ТА МОН
УКРАЇНИ (КИЇВ).

ВЧЕНИЙ СЕКРЕТАР ОРГКОМІТЕТУ :

ГОНТАР Т.М. - МННЦІТІС НАН ТА МОН (КИЇВ, УКРАЇНА).

ПРОГРАМНИЙ КОМІТЕТ:

Д-Р АВРАМОВ ЛУЧЕЗАР, ІНСТИТУТ ЕЛЕКТРОНІКИ, (СОФІЯ, БОЛГАРІЯ).
БЕРЕСТ В. П., Д.Ф.-М.Н., ХНУ ІМ. В.Н. КАРАЗИНА (ХАРКІВ, УКРАЇНА).
Д-Р ВАЛЕНЗІ ВІНЧЕНЦО, ПРОФЕСОР РИМСЬКИЙ УНІВЕРСИТЕТ, (РИМ,
ІТАЛІЯ)
Д-Р ГИЗБРЕХТ ОЛЕКСАНДР, ІНСТИТУТ ЕЛЕКТРОНІКИ, (СОФІЯ,
БОЛГАРІЯ).
БЕЛОВ В.М., Д.М.Н., ПРОФ. МННЦ ІТІС НАН ТА МОН (КИЇВ, УКРАЇНА).
БЕХ І.І., К.Ф.-М.Н, КНУ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА, (КИЇВ, УКРАЇНА).
Д-Р ПЕТКО БРАНИСЛАВ, УНІВЕРСИТЕТ ВЕТЕРИНАРНОЇ МЕДИЦИНИ ТА
ФАРМАЦІЇ (КОШИЦЕ, СЛОВАЧЧИНА).
Д-Р. НЕЄДЛІК ПАВОЛ, ІНСТИТУТ НАУК ПРО ЗЕМЛЮ САН (БРАТІСЛАВА,
СЛОВАЧЧИНА).

В. М. Белов, В. А. Козловська

**КІЛЬКІСНЕ ОЦІНЮВАННЯ ХАРАКТЕРУ ОСОБИСТОСТІ ДЛЯ
ОЗДОРОВЧОЇ РЕАБІЛІТАЦІЇ ЛЮДЕЙ З ПСИХОГЕННИМИ РОЗЛАДАМИ**
*Україна, Київ, Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій
та систем НАН та МОН України, e-mail: dep150@ukr.net*

Зростаюче навантаження сучасних надзвичайних ситуацій (COVID-19, війна) висуває на передній план збереження здоров'я населення України, що стає одним із центральних питань сучасності. Необхідно оцінювати зміну меж взаємодії людини з навколишнім екосередовищем і зрозуміти механізми, що забезпечують цю взаємодію. Збереження здоров'я людини як триєдності фізичного, психічного та соціального статусів та формування гармонійно розвиненої особистості в середовищному та інформаційному просторі продовжує залишатися пріоритетним завданням. Значення такого комплексного підходу до здоров'я людини стає особливо помітним у разі порушення взаємодії людини з середовищем на прикладі так званих психогенів, тобто розладів психологічного здоров'я, спричинених негативними зовнішніми факторами.

За звичних умов у людини «внутрішнє» та «зовнішнє», як системний гомеостаз, досить добре синхронізовані та стали один відносно одного. Порушення гомеостазу можливе з двох причин: у першому випадку усталені відносини «людина-світ» руйнуються будь-якими змінами у зовнішньому світі; у другому випадку їх змінює власна активність людини. Зміни у зовнішньому середовищі зазвичай розглядаються як стресові та вивчаються відповідними розділами психології та медицини, де вже накопичено великий емпіричний досвід. Зміни гомеостазу між зовнішнім та внутрішнім, «зсередини», через власну активність людини, в літературі вивчені набагато менше. Разом з тим, тільки при руйнуванні гомеостазу зсередини ми можемо говорити про психологічний розлад особистості, коли людина втрачає здатність активно впливати на навколишній світ, перетворювати його, руйнує звичний уклад, «виходячи за межі себе», самореалізуючись за принципом гетеростазу. Можливість людини самій повернутися до колишнього нормального психологічного стану ми покладаємо на найважливіший конструкт особистості людини, – її характер, як системотворчий радикал, що синхронізує усталені відносини «людина-світ». Залежно від того, як розвинена особистість, наскільки у людини розвинений характер, його сила, – як провідна і закріплена система свідомого контролю, настільки визначеним є вихід особистості з «внутрішньої» кризової ситуації, швидкість і рівень відновлення психічного здоров'я.

Вивчення структурно-інформаційної моделі характеру, пошук прийомів його кількісного оцінювання для цілеспрямованого застосування засобів та методів оздоровчої реабілітації (ОР), наряду з медикаментозною, визначило спрямованість наших досліджень, обумовлену також надзвичайною ситуацією, в якій опинилася Україна.

ОР розглядається як комплекс заходів для відновлення та підтримки змінених чи ослаблених функцій організму, формування необхідного функційного стану організму людини, що включає тренувальні впливи на фізіологічні системи організму, тренування та релаксацію психічних компонентів особистості та створення комфортних соціальних умов, здатних підвищити соціальну та професійну адаптивність особистості. Звідси, вся система реабілітації є складною біотехнічною

defined as the logarithm of the number of neurons, and this value is inversely proportional to the number of mutations in the genome: the information orderliness of the psyche and consciousness reduces the growth of genome entropy [3]. An experimental study conducted at Trinity College Dublin using MRI showed that quantum processes are part of the cognitive and conscious functions of the brain [2], which confirms the reality of the existence of quantum coherent subsystems in living organisms. Holographic models of consciousness, starting with K. Pribram's model, also show the role of quantum wave processes. But modeling the psyche has faced the impossibility of implementing its specific features on conventional computers, in contrast to quantum computers, in which calculations are carried out using qubits as quantum correlated particles. Microscopic quantum cells in such computers are interfaced with macroscopic classical information input-output devices, which are similar to macroscopic neural structures. To simulate the psyche, a quantum computer must consist of at least 8 specialized processors, each of which will process its own part of the total information flow. In psychoinformatics or socionics, such models are successfully used theoretically and practically [3]. Technologies already make it possible to implement these systems, and this will make it possible to simulate the psyche, thinking and consciousness.

References:

1. Aerts, D., Broekaert, J., Gabora, L., Sozzo, S. (2013) "Quantum structure and human thought" *Behavioral and Brain Sciences* 36 (3): 274–276.
2. Christian Matthias Kerskens et al. (2022) Experimental indications of non-classical brain functions. *Journal of Physics Communications*. doi: 10.1088/2399-6528/ac94be
3. Bukalov, A.V. (2023) "The nature of the psyche and consciousness, quantum computers and information models in psychoinformatics (socionics)" *Stuc. intelekt* 28(3):18-30.
4. Bukalov, A.V. (2017) "On the possible quantum nature of consciousness and psyche" *Psychology and Socionics of Interpersonal Relationships*, (9-10): 5–40.

Д.В. Велигоцький^{1,2}, А.І. Гізбрехт³, С.О. Мамілов¹

МАГНІТО-ЛАЗЕРНА ТЕРАПІЯ – ПОЄДНАННЯ ФОТОДИСОЦІАЦІЇ ГЕМОГЛОБІНІВ ТА ДІЇ МАГНІТНОГО ПОЛЯ?

¹Інститут Магнетизму НАН України та МОН України, Україна, Київ

²Національний технічний університет України "КПІ" ім. Ігоря Сікорського

³Інститут електроніки, Болгарської академії наук, Софія, Болгарія

Серед сучасних підходів у фізіотерапії спостерігається створення методів комбінованого впливу різних фізичних факторів. Одним з прикладів є магнітолазерна терапія — приклад комплексної терапії, де відбувається одночасний вплив лазера і магнітного поля. Медиками напрацьований певний експериментальний досвід щодо використання магнітно-лазерної терапії у вертебрології, травматології, гінекології, урології; для ліквідації болевих синдромів та запальних процесів, часто в тих випадках коли захворювання важко піддаються медикаментозній терапії. Клінічними дослідженнями доведено наявність у магнітного поля та низькоінтенсивного лазерного випромінювання нейропротекторної, гіпотензивної, гіполіпідемічної, антиспастичної, протинабрякової, протизапальної, знеболюючої, антиоксидантної,

імунномодулюючої та репаративної дії. Магнітолазерна терапія відновлює внутрішньоклітинний кальцієвий обмін, регулює гормональний стан організму, покращує функцію зовнішнього дихання, позитивно впливає на реологію крові і гемодинаміку, поліпшує адаптаційні процеси в організмі [1-5].

Щодо механізмів дії, існує декілька гіпотез. Деякі автори вважають, що при одночасному впливі лазерного випромінювання та магнітного поля, крім простої сумачії енергій, виникають й інші фізичні явища. Інші автори вважають, що під впливом низькоінтенсивного лазерного випромінювання в тканинах утворюються вільно заряджені іони (Na^+ , K^+ та ін.), що призводить до посилення процесу метаболізму за рахунок активізації мембранних процесів. [6-7].

Ми плануємо дослідити вплив магнітного поля на явище фотостимульованої фотодисоціації гемоглобінів - трансформації форм гемоглобіну в периферійних тканинах. Перехід оксигемоглобін – дезоксигемоглобін вивільняє кисень, що є дієвим засобом боротьби з анаеробними інфекціями, зокрема, в зоні опікових та ранвих ушкоджень, а перехід карбоксигемоглобін – дезоксигемоглобін створює передумови детоксикації організму при отруєнні чадним газом. Саме цей процес є одним з визначальних при низькоінтенсивній лазерній терапії [8]. Ми дослідимо спектральні властивості, специфічні ефекти та кінетику взаємодії випромінювання світла різного хвильового діапазону з комплексами гемоглобіну за умови впливу зовнішнього магнітного поля різної конфігурації.

Подяка. Проект МОН України «Вплив магнітного поля та лазерного випромінювання на міжфракційну перебудову молекул гемоглобіну», № ДР 0124U000326

1. Фурман, Р. Л., and О. С. Барило.. Український стоматологічний альманах. 2021. № 3, с 89.
2. Туліков, К. С., Шкель, С. В., Орел, В. М., Саленко, О. Ф., & Черняк, В. А. Science and innovation of modern world: proceedings of the 6th International scientific and practical conference (London, UK, 23-25 February 2023).-
3. Arede, D. P., Beijo, A. S., de Paula Martinez, D. M., & Beneti, I. M. (2023).. MedNEXT Journal of Medical and Health Sciences, 4(S2).
4. Gadzhula, N. G., Barylo, O. S., Furman, R. L., & Rekun, T. O. . Acta balneologica. – 2021. – Vol. 3, № 77. – P. 165–169.
5. Pasek, J., Szajkowski, S., & Ciešlar, G. (2024). Electromagnetic Biology and Medicine, 1-12.
6. Федоров, С. М. (2017). Фотобіологія та фотомедицина, 13(1, 2), 38-50.
7. І. З. Самосюк, Ю. А.Буренок, І.М. Карабань // Український медичний часопис .- 2004.- №2.- С.88-95.
8. S.S.Yesman, S.O.Mamilov, D.V.Veligotsky, A.I.Gisbrecht. Lasers in Medical Science, 2016

Д. О. Волобуєв, В. П. Берест

ВПЛИВ МІКРОВЕЗИКУЛЯЦІЇ НА БІОФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЕРИТРОЦИТІВ

*Харківський національний університет імені В.Н.Каразіна, 61022, Харків, майдан
Свободи, 4, berest@karazin.ua*

Мікровезикуляція в еритроцитах проявляється утворенням та вивільненням фрагментів плазматичної мембрани у вигляді замкнених везикул, які містять частину цитоплазми. Основними факторами утворення мікровезикул з еритроцитів є вплив фізичних чи хімічних факторів, старіння клітин, тривале зберігання. Процес утворення мікровезикул пов'язаний з перебудовою ліпідного та білкового складу мембрани еритроцитів й цитоскелету. Умовно можна виділити два основні механізми - залежний від кальцію та механічний. Серед основних фізичних властивостей мікровезикул слід зазначити їх порівняно великий діаметр від 0,1 до 1 мкм та виражену пластичність форми. Поверхневий заряд мікровезикул залежить від їх складу та може бути використаний для їх сортування та виділення. Роль у фізіології та патології: Мікровезикули відіграють важливу роль у транспорті кисню, взаємодії з імунною системою та регуляції гемостазу. Порушення процесів утворення та вивільнення мікровезикул може вести до розвитку різних патологічних станів, пов'язаних з згортанням крові, запальними процесами та новотворами. Для вимірювання рівня мікровезикуляції використовуються різні методи, включаючи електронну мікроскопію та проточну цитометрію. Інформація про мікровезикуляцію може бути використана для діагностики та моніторингу захворювань, таких як тромбози, інфекційні та онкологічні захворювання.

Крім того, явище мікровезикуляції еритроцитів має потенціал для використання в медичній практиці для діагностики анемії, виступаючи показником руйнування червоних кров'яних клітин, що може вказувати на анемію. У деяких венозних захворюваннях, таких як тромбофлебіт, мікровезикуляція може бути змінена через вплив на кров'яний потік та в'язкість. Зміни в мікровезикуляції можуть бути спостережені при судинних захворюваннях, таких як ішемічна хвороба серця або цереброваскулярна недостатність. Показники мікровезикуляції можуть слугувати індикатором ефективності лікування, наприклад, при лікуванні препаратами, що впливають на кров'яний потік або в'язкість. Зокрема, зміни в мікровезикуляції можуть бути важливими для діагностики та моніторингу захворювань судин ока, таких як діабетична ретинопатія.

Мікровезикуляцію еритроцитів здорових донорів під впливом природних антимікробних пептидів досліджували методом спектроскопії імпульсів опору у фокусованому потоці. Встановлено зміну об'єму клітин в ізотонічному розчині після інкубації з нелітичними концентраціями граміцидину S. Зроблено припущення про утворення мікровезикул з еритроцитів під дією мембранотропного пептиду, здатного викликати формування неламелярних фаз у ліпідному бішарі. Збільшення концентрації граміцидину з 0,5 до 5 мкг/мл у середовищі інкубації веде до зменшення середнього об'єму еритроцитів з 95 до 87 фл. Оцінено зміну поверхневого заряду еритроцитів після мікровезикуляції, відзначено, що потенціал пробією мембрани еритроцитів залишається незмінним після впливу антимікробного пептиду, імовірно у відбруньковуваних мікровезикулах зберігається співвідношення ліпід-білок, притаманне нативним клітинам.

культиватор, а також подачу культуральної рідини з культиватора на промисловий цифровий мультиметр UNI-T. Виміри інтенсивності біоломінесценції проводили за допомогою ФЕП-115 та пристрою для дослідів зчитування графічної інформації з сур'мяно-натрієво-цезієвим фотокатодом з частотою 1 Гц, з подальшим розрахунком їх середніх похвилинних значень. Вибір такої технології реєстрації пов'язаний з метою досягнення максимальної чутливості до змін інтенсивності біоломінесценції. В технологічній схемі такого комплексу використано промисловий цифровий мультиметр UNI-T UT171A (№160413239), що дало можливість використати персональний комп'ютер для безперервної реєстрації даних. Розроблена методика моніторингу змін інтенсивності люмінесценції *Photobacterium phosphoreum* IMV B-7071 дозволяє співставляти отримані значення з даними моніторингу флуктуацій геомагнітного поля в реальному режимі на протязі 6-7 годин. Практичний інтерес викликає використання моніторингу люмінесценції бактерій для прогнозування збурень геомагнітного поля та розвитку магнітних бур.

Голуб В.О., Салюк О.Ю., Мамілов С.О.

ВИКОРИСТАННЯ МАГНІТНИХ НАНОБІОРЕАКТОРІВ В ХІМІЇ, БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ.

*Інститут Магнетизму НАН України та МОН України,
Україна, Київ 03142, бульв. Акад. Вернадського, 36-б*

Перспектива широкого застосування магнітних наночастинок у біології, медицині та хімічних технологіях визначила новий напрямок у нанотехнології. Це призвело до виникнення цілого ряду найцікавіших фізичних проблем, вирішення яких дозволило б суттєво розширити сферу застосування наномагнетиків. Ось одне з тих завдань, що найбільш часто виникають у різних галузях науки і технології, яке складається з одного або кількох нижче перерахованих етапів. Необхідно ввести якусь речовину (наприклад, для каталізу, сорбції, очищення крові або лікування організму), доставити і утримати її в певному місці (області реакції або біля хворого органу), ініціювати вплив (каталіз, сорбцію, лікування, доставку реактивів або ліків), а потім видалити його (із зони реакції чи організму). Теоретично все це можливо здійснити, використовуючи магнітні наночастинок, які зв'язані з відповідними сполуками, а керування процесами здійснювати за допомогою магнітних полів.

Для того щоб показати можливість здійснення цього на практиці, нами були синтезовані магнітні нанореактори, покриті шаром магнітних наночастинок. Зверху на поверхню нанореакторів наносився шар ферменту, здатного окислювати глюкозу. Наявність підшару з феритових наночастинок під шаром ферменту збільшує біологічну активність за рахунок збільшення поверхні та призводить до появи у нанореактора магнітного моменту, що дозволяє маніпулювати ним за допомогою магнітного поля.

Було досліджено активність ферментного поверхневого шару на реакцію окислення глюкози в розчині. Каталітична активність в присутності магнітного поля, що обертається, зростає в два рази в порівнянні з випадком без перемішування.

Іншим актуальним завданням сучасної біології та медицини є спрямована доставка ліків до хворого органу, що дозволило б суттєво підвищити ефективність лікування, при цьому не впливаючи на весь організм або суттєво знижуючи цей

membrane-active properties, their potential neurotoxicity and its prevention". Project PAN.BFB.S.BWZ.380.022.2023.

О.І. Доценко

ГЛУТАТІОНУВАННЯ ГЕМОГЛОБІНУ ЯК СКЛАДОВА АДАПТАЦІЯ ЕРИТРОЦИТІВ ДО ГІПОКСІЇ

Україна, Вінниця, Донецький національний університет імені Василя Стуса

Еритроцити відіграють важливу роль в адаптації до гіпоксії відповідно до їх ролі в транспортуванні кисню. Тривалі лабораторні дослідження, спрямовані на розуміння відповіді еритроцитів на деоксигенацію і гіпоксію, сприяли значному прогресу в структурній і функціональній біохімії цих клітин. Молекулярні механізми адаптації до гіпоксії реалізуються за участю фізіологічно активних речовин, однією з яких може бути глутатіон. Глутатіон є не тільки важливою ланкою антиоксидантного захисту, але й здатний ковалентно зв'язуватися з тиоловими групами білків, що призводить до глутатіонілювання. Ця модифікація захищає тиолові групи від незворотного окислення та змінює функціонування білків. Глутатіонілювання гемоглобіну, що зростає при низькій патології, призводить до збільшення його спорідненості до кисню. Гемоглобін є кисень-залежним буфером глутатіону, що забезпечує адаптацію внутрішньоклітинного рівня глутатіону еритроцитів до різних рівнів кисню.

В цій роботі ми досліджуємо роль тиол-дисульфідного обміну між глутатіоном і цистеїнами клітинних білків, який вважається одним з важливих механізмів редокс-регуляції, в процесах адаптації до гіпоксії.

Для реалізації поставлених задач було проведено дослідження *in vitro* та *in silico*.

В експериментальних дослідженнях суспензію еритроцитів вводили у окисне середовище наступного складу: аскорбінова кислота (AscH) $1 \cdot 10^{-4}$ М, Cu^{2+} $5 \cdot 10^{-6}$ М, Na-фосфатний буфер (0.015 М, 0.15 М NaCl, pH 7,4) з різним вмістом глюкози. Кількість еритроцитів в середовищі інкубування відповідав вмісту гемоглобіну 3,0-3,2 мг/мл. Кількість введеної глюкози складала 0,2, 0,7, 2,0 та 4 мМ на 10^{12} еритроцитів/л. Клітини інкубували протягом 5-ти годин при 20°C. Через певні часові інтервали в гемолізаті відмитих клітин визначали вміст глутатіону (GSH) і загальну кількість -SH-груп білкової фракції. Додатково визначали вміст позаклітинного та внутрішньоклітинного перекису водню та активності деяких ферментів системи глутатіону.

Дослідження *in silico* було виконано з використанням математичної моделі, яка є розвитком моделі центрального вуглецевого метаболізму еритроцитів Holzhütter (<https://www.ebi.ac.uk/biomodels/B10MD0000000070>). Раніше, до моделі були додані процеси генерування і інактивації активних форм кисню, зокрема перекису водню та ферментна система відновлення гемоглобіну (O.Dotsenko, 2016). Для дослідження тиол-дисульфідної системи, до моделі залучені процеси за участю пероксиредоксину (Prx), тиоредоксину (Trx) і тиоредоксинредуктази (TrxR), глутаредоксину, процеси глутатіонування і деглутатіонування гемоглобіну. Враховуючи залежність процесів глутатіонування і деглутатіонування від насиченості гемоглобіну киснем, модель дозволяє досліджувати тиол-дисульфідний обмін в еритроцитах у стані гіпоксії.

Модель створена у програмі COPASI. Остаточний варіант моделі складається з 70 диференціальних рівнянь. Усі рівняння побудовані на основі точної кінетики реакцій. Для дослідження чутливості потоків реакцій і метаболітів моделі до величини парціального тиску кисню (PO_2), рівня окисного і метаболічного стресу використана процедура "Parameter Scan".

Математичне моделювання дозволяє дослідити перепрограмування метаболічних потоків у відповідь на метаболічний стрес, окисний стрес і гіпоксію. Показано, що за відсутності глюкози в середовищі інкубування в еритроцитах у стані гіпоксії переважають процеси глутатіонування, що приводить до зниження вмісту глутатіону в клітинах. За присутності фізіологічної кількості глюкози та відсутності окисного стресу у стані гіпоксії переважають процеси деглутатіонування. Показані додаткові механізми, спрямовані на підвищення рівня глутатіону у клітинах.

V.O. Zamorskyi¹, O. I. Nakonechna^{1,2}, A. V. Bodnaruk³, V. M. Kalita^{3,4},
Yu. Yu. Shlapa⁵, S. O. Solopan⁵, A. I. Tovstolytkin^{1,2}

THE EFFICIENT HEATING OF FLUIDS WITH BIOCMPATIBLE NAFeO₂ MAGNETIC NANOPARTICLES

¹ *Institute of Magnetism of the NAS of Ukraine and MES of Ukraine, Kyiv, Ukraine;*

² *Taras Shevchenko National University of Kyiv, Kyiv, Ukraine;*

³ *Institute of Physics of the NAS of Ukraine, Kyiv, Ukraine;*

⁴ *National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute",*

⁵ *V.I. Vernadsky Institute of General and Inorganic Chemistry of the NAS of Ukraine,*

The capability of magnetic nanoparticles to convert the electromagnetic energy of radiofrequency into heat has drawn strong and continuing interest in recent years [1–2]. Among others, the efficient heating of magnetic nanoobjects and fluids based on them has opened up new opportunities in medicine and biology, including the use of MNPs in the diagnosis and treatment of several diseases [3]. It has been confirmed that the use of magnetic nanoparticles as the heat mediators in magnetic fluid hyperthermia opens an efficient way to destroy malignant cells due to either inducing apoptosis by hyperthermia or by thermoablation [4].

NaFeO₂ nanoparticles were synthesized by a sol-gel technique. The brown-colored powder resulted from the synthesis was first crushed and then heated at 400 °C to get crystalline nanoparticles. TEM studies demonstrate that nanoparticles synthesized are spherically shaped and weakly agglomerated (Fig. 1). The average MNP size calculated by employing the mathematic modeling methods is in the range of 30–35 nm.

Time dependences of the temperature of fluid $T_{\text{fluid}}(t)$ with different MNPs concentration in AMF with different amplitudes and a frequency of $f = 300$ kHz were studied and their behavior was found to be qualitatively similar. Typical $T_{\text{fluid}}(t)$ curves are presented in Fig. 2 for a fluid with a particle concentration of 75 mg/ml. For convenience, the temperature of the fluid was measured in degrees Celsius.

An advantageous combination of magnetic characteristics of MNPs studied, such as the Curie and blocking temperatures (600 and 445 K, respectively) and low coercivity at room temperatures (50 Oe), which is twice as small as the maximum amplitude of AMF we used for fluid heating, enabling the possibility to achieve the efficient heating of magnetic fluids by a low-amplitude AMF through hysteresis remagnetization of nanoparticles for

Overall, in the present study, the binding sites of a set of the essential (Cu^{2+} , Fe^{3+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+}) and highly toxic (Hg^{2+} , Cd^{2+} , Au^{2+} , Pb^{2+}) metals with beta-lactoglobulin were identified using molecular docking technique. The obtained results can be useful for the development of innovative solutions for addressing challenges related to heavy metal pollution, food safety, and biomedical therapeutics.

С.І. Кіфоренко, Т.М. Гонтар, М.В. Лавренюк

**ТЕХНОЛОГІЯ ІЄРАРХІЧНОГО МАТЕМАТИЧНОГО
МОДЕЛЮВАННЯ - ІНСТРУМЕНТ СИНТЕЗУ ТА АНАЛІЗУ АЛГОРИТМІВ
ПРОГНОЗУВАННЯ ГЛІКЕМІЧНОГО ПРОФІЛЮ**

*Україна, Київ, Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних
технологій та систем НАНУ та МОНУ, gtm_kiev@ukr.net*

Аналіз тенденцій розвитку сучасного суспільства свідчить про зростаючу роль математичного моделювання як засобу створення «віртуальної реальності», що імітує реальні процеси різної природи та становить методологічну базу наукових досліджень для отримання нових знань. Зазначимо, що математичні моделі для дослідження біомедичних систем складають об'єкт біологічної та медичної кібернетики та є ефективним інструментом вирішення теоретичних та прикладних завдань. Математичне моделювання вже зіграло свою значну роль при різнобічному дослідженні біологічних систем і продовжує залишатися ефективним інструментом для розв'язання різних завдань біомедичної спрямованості, пов'язаних із діагностикою, прогнозуванням та управлінням.

Діабет складне метаболічне захворювання, яке потребує втручання спеціалістів з багатьох суміжних дисциплін: патофізіологів, фармакологів, спеціалістів з комп'ютерної техніки, тощо. Сучасні інформаційні технології, які базуються на математичному моделюванні, можуть бути ефективним допоміжним засобом підтримки прийняття рішень також в багатьох сегментах ендокринології на різних етапах процесів діагностики та лікування цукрового діабету.

Відомо, що дуже важливим є регулярне вимірювання рівня глюкози в крові – основного показника, що характеризує стан вуглеводного обміну і діабетичний статус організму. Удосконалення контролю глікемії в діабетичній практиці відбулося завдяки розробці систем безперервного моніторингу глюкози крові. Це добре, але дорого, не всім доступно і незручно. Тож важливим завданням дослідників залишається постійний пошук альтернативних рішень. **Мета** нашого дослідження – показати можливість використання технології ієрархічного математичного моделювання для розробки і дослідження алгоритмів прогнозування глікемічного профілю за умов обмежених нерегулярних вимірювань.

Розглядається процес моделювання системи регулювання вуглеводного обміну, заснований на використанні та синтезі математичних моделей різного рівня складності в єдиному комплексі. Сучасний стан комп'ютерної техніки і, у зв'язку з цим, програмно-апаратне забезпечення, що інтенсивно розвивається, як загального, так і спеціального призначення, наблизило до користувача і істотно полегшило можливості отримання рішень складних завдань, супутніх процесу моделювання на всіх етапах його реалізації. Це дозволяє розширити імітаційні можливості системи та включити до технологічної схеми моделювання не тільки фізіологічні механізми

slight temperature increase did not affect the overall intensity of bioluminescence. However, it did induce alterations in the luminescent pattern of the bacterial suspension, associated with the "dendritic" spatial arrangement of bacteria within the suspension. Specifically, the central luminescence in the Petri dish quickly diminished and remained absent throughout the microwave exposure duration. Simultaneously, the luminescence of photobacteria shifted towards the periphery, forming a "torus"-like pattern. Upon cessation of the electromagnetic field, the bacterial distribution within the suspension reverted to its initial configuration, thereby restoring the dynamic "dendritic" structure.

Conclusions. Ultra-weak microwave radiation in the millimeter range did not affect the total background luminescence of bacteria. However, small local temperature gradients induced by electromagnetic waves led to the formation of dissipative structures in the bacterial suspension. This phenomenon can be explained by the Benard-Marangoni hydrodynamic effect resulted in the emergence of convection due to temperature gradients and the separation of phases with different surface tension. The surface tension depends on both temperature and the presence of surface-active compounds, which are known to be produced by bacterial cells in order to protect them and to facilitate their movement in the water environment.

В.П. Міщай, Я.П. Лазоренко

**ДОСЛІДЖЕННЯ КІНЕТИКИ ФЛУОРЕСЦЕНЦІЇ ПОЛІМЕРНИХ СТРУКТУР
З БАРВНИКАМИ І КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ З
СЛІДОВИМИ КОНЦЕНТРАЦІЯМИ ЕНДОГЕННОГО АМІАКУ ЗА
ДОПОМОГОЮ ПОРТАТИВНОГО АНАЛІЗАТОРА ВИДИХУВАНОВОГО
ПОВІТРЯ.**

Україна, м.Київ, Інститут магнетизму НАН України і МОН України, vitarok@i.ua

На сьогоднішній день велика увага приділяється дослідженню гібридних наноструктур, що складаються з напівпровідникових нанокристалів і органічних молекул, та їх застосуванню в різноманітних сферах. Одним з таких напрямків застосування подібних структур можна розглядати засоби неінвазивної діагностики захворювань за аналізом видихуваного повітря, яке містить в собі велику кількість різних летких речовин. Для деяких з них було виявлено кореляцію певних концентрацій з конкретними захворюваннями. Однією з таких речовин являється ендогенний аміак. Він є біомаркером ряду захворювань, таких як ниркова недостатність, цироз печінки, рак легень та ін. Але застосування даних матеріалів для виявлення летких речовин у видиху людини вимагає певних характеристик, в першу чергу досить високої чутливості до аналізуючих речовин, так як концентрація таких речовин лежить в діапазоні одиниць ppm. Зокрема концентрація аміаку у подиху хворої людини зазвичай становить більше 1,5 ppm[1]. Серед інших характеристик не менш важливим є селективність по відношенню до решти речовин і компактність, як альтернатива складному лабораторному аналітичному обладнанню.

В попередній роботі [2] нами було виявлено чутливість органічного флуоресцентного барвника кумарин 7 в комплексі з нанокристалом CdTe до молекул аміаку в газоповітряній пробі.

В даній роботі приводяться результати дослідження флуоресцентних відгуків гібридних полімерних структур з флуоресцентним комплексом квантова точка –

I. A. Perepelitsa¹, V. P. Berest¹, G. A. Bozhok²

STUDY OF THE INTERACTION OF ANTIMICROBIAL PEPTIDES WITH MEMBRANES: EXPERIMENTAL APPROACHES AND RESULTS

¹*V. N. Karazin Kharkiv National University*

4 Svobody Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine

²*Institute for Problems of Cryobiology and Cryomedicine, Natl. Acad. of Science of Ukraine, 23 Pereyaslivska St., 61016 Kharkiv, Ukraine.*

igorperepelitsa06@gmail.com

Antimicrobial peptides (AMPs) are compact molecules with a positive charge or amphipathic structure. A notable advantage is their affinity for bacterial membranes, which typically contain teichoic acid and lipopolysaccharide, and eukaryotic membranes, which contain dipalmitoyl phosphatidylcholine, which allows for the formation of a negative charge on the surface. This facilitates the initial electrostatic attraction of cationic AMPs. Positively charged AMP has a strong electrostatic interaction with negatively charged phospholipids on the outer leaflet of the bacterial membrane [1,2].

Cationic AMPs can have a low level of specificity in cell interaction, which leads to undesirable interaction with non-target cells. Liposomal containers are used to screen the delivery of the active substance [1]. The addition of substances such as cholesterol and cardiolipin to their composition is aimed at improving the quality of encapsulation and release of the peptide into the vesicle membrane and its stability [1]. Varying the concentration of cardiolipin during liposome formation allows modeling the level of their potential at the hydrodynamic shear limit (zeta potential) [1].

The antimicrobial peptide gramicidin S (GrS), which is a cyclic decapeptide, was used to analyze such effects. Our experimental data obtained by light scattering and fluorescent microscopy certifies. According to existing data, GS will exhibit an antibacterial effect at a concentration in the range of 3 to 12.5 µg/ml [2], while increasing the concentration to 18.7 µg/ml, a cytotoxic effect on cell culture occurs, and hemolysis, in particular of red blood cells, occurs at a concentration of 35.2 µg/ml.

We assume that the different compositions of liposomes may affect the quality of the capture and release of the active substance. In the study, we used L929 cells (fibroblast cells), which were incubated with liposomes of different lipid compositions loaded with GS at concentrations of 10, 25, 50, and 75 µg/ml. Cell viability and adhesion properties were analyzed. The level of cell viability was assessed using the FDA/EB staining test. The results showed that liposomes loaded with the peptide at concentrations of 10 and 25 µg/ml did not significantly affect cell viability, but treatment with liposomes loaded with GS at concentrations of 50 and 75 µg/ml led to a decrease in the indicator. When liposomes of different compositions were incubated with GS at concentrations of 50 and 75 µg/ml, the adhesive properties of cells also decreased. The confluency of the cell monolayer at these concentrations was in the range of 67-75% (compared to the control, there was a decrease of about 17-25%). The confluence of the monolayer of cells treated with liposomes of different compositions with GS at concentrations of 10 and 25 µg/ml did not differ significantly from the intact control.

[1] Pande S. Liposomes for drug delivery: review of vesicular composition, factors affecting drug release and drug loading in liposomes. *Artif Cells Nanomed Biotechnol.* 2023 Dec;51(1):428-440. doi: 10.1080/21691401.2023.2247036. PMID: 37594208.

- [2] Kondejewski LH, Farmer SW, Wishart DS, Hancock RE, Hodges RS. Gramicidin S Is Active Against Both Gram-Positive and Gram-Negative Bacteria. *Int J Pept Protein Res.* 1996;47(6):460-6. <https://doi.org/10.1111/j.1399-3011.1996.tb01096.x>

Prokhorets V.A.^{1,2}, Mamilov S.O.³, Afanasieva T.V.¹

ELECTRONIC EXCITATION SPECTRA OF α AND β SUBUNITS OF THE OXYHEMOGLOBIN.

¹*Ukraine, Kyiv, Institute of Physics of the NAS of Ukraine, Physical Electronics Department.*

²*Ukraine, Kyiv, Taras Shevchenko University of Kyiv.*

³*Ukraine, Kyiv, Institute of Magnetism NAS of Ukraine and MES of Ukraine.
E-mail: tetiana.v.afanasieva@gmail.com*

The photodissociation of oxyhemoglobin is explored because of its use in biomedical applications such as photodynamic phototherapy. UV-VIS spectroscopy and ab initio calculations are widely used to clarify the mechanisms of laser-induced photodissociation. It is known that the photodissociation of oxyhemoglobin involves structural changes in the protein. However, the difference between the α and β subunits has been neglected in the theoretical models.

We explore the effect of protein structure as well as solvation effect on optical absorption spectra of oxyhemoglobin using a hybrid quantum mechanical-molecular mechanical (QM/MM) method and embedded clusters - SIMOMM (Surface Integrated Molecular Orbital Molecular Mechanics) with GAMESS/TINKER software [1,2]. Density functional theory method and all-electron 6-31G(*p,d*) basis set with *p*, *d* polarization functions were used for the QM region. The MM region was described using the MM3 force field for the protein atoms. Solvent effects are included using the polarizable continuum model (PCM) in a water solvent.

First, we obtained optimized geometries for α and β subunits of the oxyhemoglobin in vacuum and solvent. Then, correspondent electronic excitation spectra were calculated (Fig.1) and compared with the experiment.

The protein environment causes a larger redshift of the Soret band for β subunit than for α subunit. Also, the Soret band of the isolated oxyheme is blueshifted compared to those of α and β subunits.

Solvation causes significant redshifts of the Soret band for both α and β subunits and the Q-bands for β subunit.

Moreover, we have analyzed singlet-triplet excited states up to 1300 nm. We did not find significant spectral features in the range of 900-1200 nm in singlet-singlet spectra. In contrast, the singlet-triplet transitions can be responsible for the spectral features in the range of 800-1000 nm.

- [1] Jahanzeb Shahid, Rizwan Ahmad, Adnan K. Kiani, Tahir Ahmad, Saqib Saeed, Abdullah M. Almuhaidib, Data Protection and Privacy of the Internet of Healthcare Things (IoHTs). Appl. Sci. 2022, 12(4), 1927. URL: <https://doi.org/10.3390/app12041927>. doi:10.3390/app12041927.
- [2] Mays Alshaiikhli, Tarek Elfouly, Omar Elharrouss, Amr Mohamed, Najmath Ottakath, Evolution of Internet of Things from Blockchain to IOTA: A Survey. IEEE Access, vol. 10, 844. URL: <http://dx.doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3138353>. doi:10.1109/ACCESS.2021.3138353.
- [3] Dedeoglu, Volkan & Jurdak, Raja & Dorri, Ali & Lunardi, Roben & Michelin, Regio & Zorzo, Avelino & Kanhere, Salil. (2019). Blockchain Technologies for IoT. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-981-13-8775-3_3. doi: 10.1007/978-981-13-8775-3_3.
- [4] "IEEE Standard for an Architectural Framework for the Internet of Things (IoT)," in IEEE Std 2413-2019, vol., no., pp.1-269, 10 March 2020, doi: 10.1109/IEEESTD.2020.9032420. URL: <http://dx.doi.org/10.1109/IEEESTD.2020.9032420>
- [5] Al-Kahtani MS, Khan F, Taekeun W. Application of Internet of Things and Sensors in Healthcare. Sensors (Basel). 2022 Jul 31;22(15):5738. doi: 10.3390/s22155738. PMID: 35957294; PMCID: PMC9371210. URL: <https://doi.org/10.3390/s22155738>.
- [6] Frimpong, Bismark Atta & Barbosa, Claudia & Alhameed, Raed. (2023). The Impact of the Internet of Things (IoT) on Healthcare Delivery: A Systematic Literature Review. Journal of Techniques. 5. 84-91. URL: <http://dx.doi.org/10.51173/jt.v5i3.1433>. doi: 10.51173/jt.v5i3.1433.

Стрикун¹ О.В., Мамілов² С.О., Бех¹ І.І.

**ПРОТОТИП АПАРАТНО-ПРОГРАМНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ МЕТОДІВ
ПОТОЧНОГО КОНТРОЛЮ ЗА ЗМІНАМИ СТАНУ ЗДОРОВ'Я ОТРУЄНИХ
ЧАДНИМ ГАЗОМ**

*¹Україна, Київ, Київський національний університет імені Тараса
Шевченка, email: alik49410@gmail.com*

*²Україна, Київ, Інститут магнетизму НАН і МОН України,
email: tamilovserge@gmail.com*

Оцінка стану здоров'я осіб, що постраждали від впливу монооксиду вуглецю, включає перелік показників, що дозволяють формувати діагноз та визначати необхідність медичної допомоги [1]. Ці показники включають стан легеневої вентиляції, діяльність серця, газообмін, концентрацію окси- та карбоксигемоглобіну в артеріальній крові, а також рівень вуглекислого газу та монооксиду вуглецю у видиху [2].

Небезпека полягає у тому, що чадний газ утворює із гемоглобіном крові стійку сполуку - карб оксигемоглобін. Це знижує кисень-транспортну спроможність крові, викликаючи гіпоксію та порушення клітинного метаболізму [3].

Точні методи визначення рівня отруєння чадним газом [4] вимагають інвазійних тестів крові, які є тривалими процедурами [5], а для неінвазійного контролю вмісту монооксиду вуглецю в крові існує обмежена кількість біофізичних технологій. В нашій роботі за основу взята неінвазійна методика визначення

відносної концентрації окси- та карбоксигемоглобіну в артеріальній крові, описана в [6, 7]. Мета роботи - створити прототип бездротового компактного мобільного приладу для неінвазійного експрес-контролю за станом отруєних чадним газом чи палінням.

Для визначення рівня кисню та монооксиду вуглецю в крові використовується методика трипроменевої спектрофотометрії [6, 7]. Вимірювання абсорбції світла здійснюється в моменти максимуму амплітуди сигналу фотоприймача для трьох довжин хвиль випромінювання. Для отримання найбільшої чутливості при визначенні сатурації киснем довжини хвиль випромінювання джерел лежать в ділянках спектру з найбільшою різницею в поглинанні світла оксигемоглобіном і гемоглобіном. Цій умові задовольняють червона і ближня інфрачервона області спектру випромінювання, а для карбоксигемоглобіну - інфрачервона та зелена.

При створенні системи збирання та первинної обробки даних використано інтегрований пульсоксиметричний модуль та монітор серцевого ритму MAX30105 від компанії Maxim Integrated (США) [8]. Він включає вбудовані світлодіоди, фотодетектор, оптичні елементи та електроніку з малим рівнем власних шумів і захистом від впливу навколишнього світла. Для керування оптичним датчиком використано плату мікроконтролера ESP32 [9]. Програмування плати мікроконтролера здійснювалося в середовищі розробки Arduino IDE, бібліотеку для підтримки програмування мікроконтролерів ESP та бібліотеку для датчика MAX30105 під назвою SparkFun_MAX3010x_Sensor_Library [10]. Паралельно тривала розробка програмного забезпечення, необхідного для визначення рівня насичення крові киснем та рівня отруєння чадним газом з використанням методики, описаної в роботах [6, 7]. Програмна реалізація алгоритму визначення рівня окси- та карбоксигемоглобіну в артеріальній крові детально описана в [11, 12].

На основі масиву даних, отриманих за допомогою створеного прототипу, було обчислено середнє значення рівня SaO_2 , яке становить 0.93 або 93% та середнє значення SaCO - 0.05 або 5%. Ці значення узгоджуються як з результатом, отриманим за допомогою побутового пульсоксиметра HEACO CMS50C, так і нормальними показниками значень окси- та карбоксигемоглобіну в крові.

1. Hampson N.B. U.S. Mortality Due to Carbon Monoxide Poisoning, 1999-2014. Accidental and Intentional Deaths. 2016. Ann Am Thorac Soc. 13. P. 1768;
2. Humber A. Carbon monoxide the silent killer. London HART CO study. 2012. 21 p. URL: <https://www.bedfont.com/file/2050-2012%20-%20Humber>
3. Guzman, J.A. Carbon monoxide poisoning. 2012. *Critical care clinics*. 28 (4). P. 537-548.
4. Burnett R.T., Dales R.E., Brook J.R., Raizenne M.E., Krewski D. Association between ambient carbon monoxide levels and hospitalizations for congestive heart failure in the elderly in 10 Canadian cities. // *Epidemiology*. - 1997; - vol. 8. - P. 162-167.
5. Monov A., Dishovsky C. Medical Aspects of Chemical and Biological Terrorism. // Publishing House of the Union of Scientists in Bulgaria. - Sofia. - 2005. - 354.
6. Ю.С. Плаксий, С.О. Мамілов, С.С. Єсьман. Спосіб визначення відносної концентрації карбоксигемоглобіну в артеріальній крові. // Патент України №89354.
7. M.M. Asimov, R.M. Asimov, A.N. Rubinov, S.O. Mamilov, Yu.S. Plaksiy. // *Proceeding of SPIE*. - 2006. - vol. 6251. - P. 147-154.

- ентальпія дисоціації протону (Proton Dissociation Enthalpy, PDE) розраховувалася за формулою: $PDE = H_{ArO\cdot} + H_N^+ + H_{ArOH^+}$, де $H_{ArO\cdot}$ – ентальпія радикалу; який виник внаслідок дисоціації протона від антиоксиданта; H_N^+ – ентальпія протону; H_{ArOH^+} – ентальпія катіон-радикалу [1]. В розрахунках були використані наступні константи ентальпій: $H_{(H)} \text{ вакуум} = -0,49764 \text{ Ha}$ [4]; $H_{(H^+)} \text{ вакуум} = 0,00236 \text{ Ha}$ [5]; $H(e^-) = 0,00119 \text{ Ha}$ [6]. Відповідно, $1 \text{ Ha} = 627,51 \text{ ккал/моль}$ $27,211 \text{ eV}$. Всі розрахунки були виконані для умов вакууму при 298 K° .

Розрахунок ентальпії гемолітичної дисоціації O-H зв'язку (BDE) DDMP дозволив охарактеризувати стабільність 3-OH і 5-OH зв'язків в гідроксильних групах. Встановлено, що показник дисоціації 3-OH зв'язку був дуже високим – $107,4 \text{ ккал/моль}$, що свідчить про нездатність гідроксильної групи в цьому положенні брати участь в реакціях інактивації АФК. Ентальпія гемолітичної дисоціації 5-OH зв'язку становила $82,4 \text{ ккал/моль}$ і перевищувала BDE гідроксильних груп в цьому положенні для Моріна, галангіна і каемферола на $5,36$; $6,25$ і $6,09 \text{ ккал/моль}$. Це вказує на потенційну можливість DDMP інактивувати стрес-агенти через механізм SET.

1. Mikulski D, Eder K, Molski M. Quantum-Chemical study on relationship between structure and antioxidant properties of hepatoprotective compounds occurring in *Cynara Scolymus* and *Silybum Marianum*. Journal of Theoretical and Computational Chemistry. 2014; 13(1):1–24
2. Frisch M. J, Trucks G. W, Schlegel H. B, et.al, Gaussian 09, Revision A.02. Gaussian Inc., Wallingford, CT 2009
3. Lee C, Yang R. G, Parr W. Development of the Cole-Salvetti correlation energy formula into a functional of the electron density. Physical Review. 1988; 37(2):785–789
4. Wright J. S, Johnson E. R, DiLabio G. A. Predicting the activity of phenolic antioxidants: theoretical method, analysis of substituent effects, and application to major families of antioxidants. Chem. Soc. 2001; 123(6):1173–1183.
5. Klein E, Rimarcik J, Lukes V. DFT/B3LYP study of the O-H bond dissociation enthalpies and proton affinities of para- and meta-substituted phenols in water and benzene. Acta Chim. Slovaca. 2009; 2(2):37–51
6. Bartness J. E. Thermodynamics of the electron and the proton. J. Phys. Chem. 1994; 96:6420–24

Yu.G. Terentieva^a, I.M. Dmitruk^a, K.O. Maiko^a, A.M. Rashevskaya^a, Ye.Yu. Stepanenko^b

THE AMBIENT TEMPERATURE ATP WATER SOLUTION FLUORESCENCE AS AN INDICATOR OF RACEMIC ENANTIOMERS MIXTURE MANIFESTATION

^aUkraine, Kyiv, Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, 60 Volodymirskaya Str., 03127

^bUkraine, Kyiv, Institute of Molecular Biology and Genetics of NASU, 150 Ac. Zabolotnogo Str., 03143. maiko_kate@ukr.net

The understanding of structural geometry of ATP is important for precisely analysis and description of processes of nucleic acid synthesis, energy transfer, metabolism, interaction with enzymatic, regulatory and structural proteins as ligand. Here we applied

both theoretical and experimental methods to define possible conformers of ATP, which may be found in the aqueous solution.

Experimental results are presented on figure 2. It is obvious that fluorescence shape in first order of diffraction contains two emission bands (I, II) which in the second diffraction order are separated more clearly. These two bands correspond, in our opinion, to different enantiomers which we believe, are formed due to rotational motion around the N-C bond (fig.1). The theoretical part presents quantum-chemical modeling of molecular geometry of ATP (non-empirical DFT/6-311G+(d,p)/B3LYP level of theory). As the result, we created the conformer profile for ATP molecule in water surround around fixed N-C bond and defined two conformers with the lowest energies (fig.3). So the both experimental and theoretical approaches are in a good agreement.

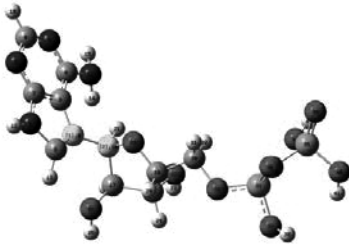


Fig. 1 ATP molecule model

Fig.3 The conformer profile for ATP molecule in water

Fig. 2 Demonstrates two harmonics (I, II)

М.І. Шафраньош, Г.Р. Магус, М.В. Різак, О.І. Шафраньош, М.О. Маргітич, М.І. Суховія

БІОФІЗИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРВИННИХ ПРОЦЕСІВ РАДІАЦІЙНОГО УРАЖЕННЯ БІОСИСТЕМ

Україна, Ужгород, Ужгородський національний університет, misshafr@gmail.com

Інформація про початкові процеси поглинання енергії випромінювання необхідна для з'ясування механізмів радіобіологічних процесів. Відомо, що при опроміненні речовин різними видами високоенергетичної радіації утворюються вторинні електрони. Велика кількість вторинних електронів має енергії від 0 до

десятків еВ – тобто є повільними електронами. Саме з повільними електронами пов'язують основну частину деструктивних змін на молекулярному рівні біоструктур. При цьому головною мішенню стають генетичні макромолекулярні структури. Тому для вирішення багатьох важливих проблем в області біофізики, медицини та екології необхідна інформація про молекулярні механізми впливу випромінювання різної природи на біомолекули, особливо ДНК і РНК. Особливості перебігу фізичних процесів у молекулах нуклеїнових кислот та їх компонентів при дії низькоенергетичних електронів будуть адекватно відображати різноманітні біологічні наслідки у живих клітинах, в тому числі й радіаційно-індуковані генетичні зміни (мутації, синтез аномальних білків тощо).

Взаємодія повільних електронів з молекулярними складовими ДНК і РНК може служити адекватною моделлю для вивчення механізмів радіаційно-індукованих змін у генетичних структурах. Важливо, що з допомогою пучка монокінетичних низькоенергетичних електронів регульованих енергій, на відміну від фотозбудження, можна отримати дані не лише про оптично дозволені переходи між станами електронної системи молекул, але і про інтеркомбінаційні переходи, в результаті яких ефективно утворюються метастабільні триплетні стани молекул. Як відомо, збуджені, зокрема метастабільні, та іонні стани біомолекул, а також міграція енергії відіграють визначальну роль у реалізації первинних фізичних стадій складних біологічних процесів (наприклад, біоенергетичних перетворень, фотосинтезу, ферментативного каталізу, а також радіобіологічних реакцій та канцерогенезу).

Авторами вперше досліджені збудження та іонізація молекул азотистих основ нуклеїнових кислот у газовій фазі повільними монокінетичними електронами, енергія яких регулювалася у діапазоні від 0 до 100 еВ. Експериментально отримані спектри фотоемісії (люмінесценції) цитозину, тиміну, урацилу, аденіну та гуаніну під дією електронного удару в області довжин хвиль 200–500 нм для різних енергій бомбардуючих електронів. Виявлено, що емісійні спектри мають складну структуру. У спектрах чітко проявляється низка молекулярних смуг, кількість та інтенсивність яких залежить від енергії налітаючих електронів. У діапазоні 0 – 100 еВ досліджені енергетичні залежності перерізів збудження та іонізації молекулярних смуг та проаналізовані їхні особливості: енергетичні пороги, форма функцій, положення максимумів. Аналіз функцій збудження показав наявність інтеркомбінаційних переходів з утворенням триплетних метастабільних станів молекул. Здійснені квантово-хімічні розрахунки основних параметрів фізичної структури нуклеотидних основ. Таким чином, дослідження особливостей взаємодії електронів малих енергій з біомолекулами становить інтерес не лише для фізики, але й для прикладної біофізики, медрадіології та радіаційних технологій.

- В. М. Белов, В. А. Козловська **КІЛЬКІСНЕ ОЦІНЮВАННЯ ХАРАКТЕРУ ОСОБИСТОСТІ ДЛЯ ОЗДОРОВЧОЇ РЕАБІЛІТАЦІЇ ЛЮДЕЙ З ПСИХОГЕННИМИ РОЗЛАДАМИ** 4
- R.Ye. Brodskii, O.V. Vashchenko **A MATHEMATICAL MODEL FOR DRUG RELEASE AND DISTRIBUTION IN ARTIFICIAL LIPID MEMBRANES** 5
- A.V. Bukalov **QUANTUM PROPERTIES OF THE PSYCHE AND BRAIN, QUANTUM COMPUTERS AND PSYCHOINFORMATICS (SOCIONICS)** 6
- Д.В. Велигоцький, А.І. Гізбрехт, С.О. Мамілов **МАГНІТО-ЛАЗЕРНА ТЕРАПІЯ – ПОЄДНАННЯ ФОТОДИСОЦІАЦІЇ ГЕМОГЛОБІНІВ ТА ДІЇ МАГНІТНОГО ПОЛЯ?** 7
- Д. О. Волобуєв, В. П. Берест **ВПЛИВ МІКРОВЕЗИКУЛЯЦІЇ НА БІОФІЗИЧНІ ХАРАКТЕРИСТИКИ ЕРИТРОЦИТІВ** 9
- I. V. Gerasimchuk and V. S. Gerasimchuk **ADSORPTION OF REAL POLYMER CHAINS IN THE SYSTEM WITH TWO METASURFACES IN A CONSTANT MAGNETIC FIELD** 10
- O. Gnatyuk, M. Olenchuk, A. Tolochko, G. Monastyrskiy, G. Dovbeshko, **SPECTRAL MARKERS OF LIPID MICRODOMAINS IN LIPOSOME MODELS WITH DIFFERENT CHOLESTEROL AND SPHINGOMYELIN CONTENT** 11
- O. Gnatyuk, D. Kolesnyk, G. Solyanik, S. Hnatiuk, G. Dovbeshko **SPECTRAL MARKERS OF SODIUM OXAMATE EXPOSURE ON LEWIS LUNG CARCINOMA CELLS UNDER DIFFERENT INCUBATION CONDITIONS.** 12
- Ю.П.Горго, І.О.Грецький, О.М.Громозова, В.В.Невгад **УМОВИ ПРОВЕДЕННЯ МОНИТОРИНГУ ЗМІН ІНТЕНСИВНОСТІ ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ *P. PHOSPHOREUM*** 13
- Голуб В.О., Салюк О.Ю., Мамілов С.О. **ВИКОРИСТАННЯ МАГНІТНИХ НАНОБІОРЕАКТОРІВ В ХІМІЇ, БІОЛОГІЇ ТА МЕДИЦИНІ.** 14
- G.Dovbeshko, O.Gnatyk, V.Boiko, N. Kryanova, N.Pozdnyakova, W.Strek, T.Borisova **POLLUTION FROM CARBON-METAL NANOHYBRIDS RESULTING FROM WAR POSES HEALTH HAZARD** 15
- О.І. Доценко **ГЛУТАТІОНУВАННЯ ГЕМОГЛОБІНУ ЯК СКЛАДОВА АДАПТАЦІЇ ЕРИТРОЦИТІВ ДО ГІПОКСІЇ** 16
- V.O. Zamorskyi, O. I. Nakonechna, A. V. Bodnaruk, V. M. Kalital, Yu. Yu. Shlapa, S. O. Solopan, A. I. Tovstolytkin **THE EFFICIENT HEATING OF FLUIDS WITH BIOCOMPATIBLE NAFE₂O₃ MAGNETIC NANOPARTICLES** 17
- О.А. Zhytniakivska, U.K. Tarabara, K.O. Vus, V.M. Trusova, G.P. Gorbenko **DECIPHERING THE MOLECULAR DETAILS OF INTERACTIONS** 19

**BETWEEN HEAVY METALS AND BETA-LACTOGLOBULIN:
MOLECULAR DOCKING STUDY**

- С.І. Кіфоренко, Т.М. Гонтар, М.В. Лавренюк **ТЕХНОЛОГІЯ** 20
ІЄРАРХІЧНОГО МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ -
ІНСТРУМЕНТ СИНТЕЗУ ТА АНАЛІЗУ АЛГОРИТМІВ
ПРОГНОЗУВАННЯ ГЛІКЕМІЧНОГО ПРОФІЛЮ
- Т.А. Кобзар, Т.В.Крячок, П.В.Чалий **СТРЕСОСТІЙКІСТЬ VS** 21
ПСИХОСОМАТИКИ
- G. I. Kovtun, D. Casas, T. Cuberes **SCANNING PROBE MICROSCOPY OF** 22
POLYVINYL ALCOHOL/CHITOSAN FILMS
- Я. П. Лазоренко, В. П. Міщай **ФЛУОРЕСЦЕНЦІЯ ПЛІВОК ПОРИСТОГО** 23
КРЕМНЕЗЕМУ З ІМОБІЛІЗОВАНИМ КУМАРИНОМ 1 АБО
КУМАРИНОМ 4 ПРИ СОРБЦІЇ ЕНДОГЕННОГО АЦЕТОНУ З
ПОВІТРЯ ВИМІРЯНА ПОРТАТИВНИМ АНАЛІЗАТОРОМ
- Д. А. Лядов, В. П. Берест **ВИКОРИСТАННЯ ПІДХОДІВ** 25
МІКРОФЛЮЇДКИ У МЕДИЧНІЙ ДІАГНОСТИЦІ
- V.S. Martyniuk, O.M. Gromozova, I.O. Hretskyi, Yu.V. Tseyslyer 26
BIOLUMINESCENCE OF PHOTOBACTERIA PHOTOBACTERIUM
PHOSPHOREUM IMV B-7071 UPON EXTREMELY WEAK MICROWAVE
RADIATION
- В.П. Міщай, Я.П. Лазоренко **ДОСЛІДЖЕННЯ КІНЕТИКИ** 27
ФЛУОРЕСЦЕНЦІЇ ПОЛІМЕРНИХ СТРУКТУР З БАРВНИКАМИ І
КВАНТОВИМИ ТОЧКАМИ ПРИ ВЗАЄМОДІЇ З СЛІДОВИМИ
КОНЦЕНТРАЦІЯМИ ЕНДОГЕННОГО АМІАКУ ЗА ДОПОМОГОЮ
ПОРТАТИВНОГО АНАЛІЗАТОРА ВИДИХУВАНОВОГО ПОВІТРЯ
- М. Olenchuk, O. Gnatyuk, G. Dovbeshko, G. Levchenko, G. Monastyrskiy, A. 28
Tolochko **CAN 2D WS2 AND MOS2 NANOPARTICLES INFLUENCE ON**
FORMATION AND PROPERTIES OF LIPOSOMES?
- М.М.Опаленик, О.М.Громозова, І.О. Грецький, Ю.П. Горго **РОЗРАХУНКИ** 29
КОРЕЛЯЦІЙ МІЖ НИЗЬКОЧАСТОТНИМИ ВАРІАЦІЯМИ
ГЕОМАГНІТНОГО ПОЛЯ ТА РЕАКЦІЮ МЕТАХРОМАЗІЇ
ВОЛЮТИНОВИХ ГРАНУЛ ДРІЖДЖІВ
- Остапенко О.С., Мамілов С.О., Бех І.І. **ПРОТОТИП СИСТЕМИ** 30
ЗБИРАННЯ ТА ПЕРВИННОГО ОБРОБЛЕННЯ ДАНИХ ДЛЯ
ВИМІРЮВАННЯ РІВНЯ ГЛЮКОЗИ У КРОВІ З ВИКОРИСТАННЯМ
СПЕКТРОСКОПІЇ БЛИЖНЬОГО ІЧ ДІАПАЗОНУ
- I. A. Perepelitsa, V. P. Berest, G. A. Bozhok **STUDY OF THE INTERACTION** 33
OF ANTIMICROBIAL PEPTIDES WITH MEMBRANES:
EXPERIMENTAL APPROACHES AND RESULTS
- Prokhorets V.A., Mamilov S.O., Afanasieva T.V. **ELECTRONIC EXCITATION** 34

SPECTRA OF α AND β SUBUNITS OF THE OXYHEMOGLOBIN.

Sliusarenko D. G., Netreba A. V. **HYBRID APPROACH TO NOISE PROCESSING WITH INTEGRATION OF RESIDUAL CONNECTIONS INTO DAE** 35

В.О.Соколов, С.О.Мамілов **НЕЛІНІЙНИЙ ВІДГУК НА ЛАЗЕРНЕ ОПРОМІНЕННЯ ПОКАЗНИКА ЗАЛОМЛЕННЯ ЦИБУЛІ ГОРОДНЬОЇ (ALLIUM CERA)** 36

Срібний В.О., Чепель Л.В., Бойко Ю.В. **ЗАСТОСУВАННЯ ЛАНЦЮГА БЛОКІВ ДЛЯ ОПРАЦЮВАННЯ ДАНИХ IMP** 37

Стрикун О.В., Мамілов С.О., Бех І.І. **ПРОТОТИП АПАРАТНО-ПРОГРАМНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ МЕТОДІВ ПОТОЧНОГО КОНТРОЛЮ ЗА ЗМІНАМИ СТАНУ ЗДОРОВ'Я ОТРУСНИХ ЧАДНИМ ГАЗОМ** 39

Улзійжаргал Ерденцогт, Ю.П.Горго, І.О.Скороход **КВАНТОВІ РОЗРАХУНКИ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПОКАЗНИКІВ АНТИОКСИДАНТНИХ МЕХАНІЗМІВ МЕТАБОЛІТУ DDMP.** 41

Yu.G. Terentieva, I.M. Dmitruk, К.О. Маiko, A.M. Rashevskaya, Ye.Yu. Stepanenko **THE AMBIENT TEMPERATURE ATP WATER SOLUTION FLUORESCENCE AS AN INDICATOR OF RACEMIC ENANTIOMERS MIXTURE MANIFESTATION** 42

М.І. Шафраньош, Г.Р. Марус, М.В. Різак, О.І. Шафраньош, М.О. Маргітич, М.І. Суховія **БІОФІЗИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПЕРВИННИХ ПРОЦЕСІВ РАДІАЦІЙНОГО УРАЖЕННЯ БІОСИСТЕМ** 43