

**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 свідомо-вольового 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

інформаційно-керованою системою, що включає засоби і методи реабілітації та самого реабілітованого, де здоров'я стає керованим процесом.

Розроблена нами комп'ютерна система анкетування «опорних» властивостей характеру та його кількісна оцінка (ТОХО) дозволяють зробити висновки про «внутрішній» поточний стан досліджуваного, визначити його типологію, життєстійкість, соціальну установку на одужання та намітити клас ОР з урахуванням його особистісних переваг.

R.Ye. Brodskii¹, O.V. Vashchenko²

A MATHEMATICAL MODEL FOR DRUG RELEASE AND DISTRIBUTION IN ARTIFICIAL LIPID MEMBRANES

*¹Institute for Single Crystals, National Academy of Science of Ukraine,
60 Nauky Ave, 61072 Kharkiv, Ukraine, r.brodskii@gmail.com*

*²Institute for Scintillation Materials, National Academy of Science of Ukraine,
60 Nauky Ave., 61072 Kharkov, Ukraine*

Experiments data on drug release and distribution in membrane medium were obtained by means of differential scanning calorimetry (DSC) as kinetic profiles of membrane phase transition temperatures (the main transition and the pre-transition) [1, 2]. Multilamellar vesicles of fully hydrated phosphatidylcholines were used as the membrane medium. It was established that the profiles could be fitted quite well by a monoexponential or diexponential dependences. Simultaneously, the pronounced splitting of the main phase transition peak, both in kinetic and in equilibrium states, was observed. In the present work, a model is suggested to explain some physical basis of the phenomena.

Actually, superposition of two processes is under consideration, namely, (1) drug release into the external water and (2) drug distribution inward the vesicles with sorption on ever-deeper lipid bilayers. The diexponential dependence found experimentally for the pre-transition profiles $\Delta T_p(t)$ may be presented in the form

$$\Delta T_p(t) = \Delta T_{p,eq} \left(1 - a e^{-\xi t} - (1-a) e^{-\gamma t} \right),$$

here $\Delta T_{p,eq}$ is the equilibrium value of ΔT_p ; a , ξ and γ are constants. Initially, $\Delta T_p(0) = 0$, i.e. the vesicles are assumed to be dopant-free.

In the model developed, Eq. (1) has been obtained as the solution of a system of interrelated linear first-order differential equations. One of them is for drug concentration $c_0(t)$ in the external ('intervesicular') water and another is for average drug concentration $c(t)$ in the interbilayer ('intravesicular') water. The pre-exponent coefficients obtained experimentally by approximation with Eq. (1) are both negative. This may take place if certain non-zero drug concentration c_{0s} is in the intervesicular water at $t=0$ (i.e. at the start of drug diffusion into the vesicles).

If the diffusion is rather fast in comparison to drug release ($\gamma \gg \xi$), the diexponential dependence (1) reduces to a monoexponential one, as it was observed in [1].

Such dependence corresponds to the case when $c(t) = c_0(t)$ at any time which seems quite natural for rapid diffusion.

The splitting of the main phase transition peak reflects co-existing of lipid layers of two types. The first type corresponds to drug-saturated external layers of the vesicles. The second type reflect phase transitions of the internal lipid layers with low but non-homogenous drug content. Stages of saturation and depletion are considered under the assumption of drug retention by the external lipid layers whilst decreasing of drug concentration in the intravesicular water. We suppose that the model is quite applicable to characterize release and distribution for wide range of drug substances.

References:

1. O.V. Vashchenko, O.A. Ruban, I.V. Zupanets, P.V. Vashchenko, O.I. Ivaniuk. Kinetic biopharmaceutical studies of a new paracetamol – glucosamine analgetic drug. *Biophys. Bull.*, 2023. (50), 25–35. <https://doi.org/10.26565/2075-3810-2023-50-03>.
2. Vashchenko O.V., Ruban O.A., Lisetsky L.N., Davydova I.O., Vashchenko P.V. Assessment of drug release and permeation in model lipid membranes: a kinetic approach // Збірник тез доповідей ІХ з'їзду Українського біофізичного товариства, 30 жовтня - 1 листопада 2023, Київ. – P. 42-44.

A.V. Bukalov

**QUANTUM PROPERTIES OF THE PSYCHE AND BRAIN,
QUANTUM COMPUTERS AND PSYCHOINFORMATICS (SOCIONICS)**

Ukraine, Kiev, International Institute of Socionics, bukalov.physics@socionic.info

Up to date, a significant number of studies and facts have appeared demonstrating not only classical, but also quantum properties in the functioning of the brain, psyche and consciousness. From considering the psyche as a macroquantum phenomenon, it follows that all the features of quantum phenomena necessarily arise in it [3, 4]. Therefore, in the field of Quantum Cognition, quantum theory is applied to model cognitive phenomena including information processing in the human brain, studies of language and speech, decision-making processes, memory, concept formation, judgment and perception. Its application began in the 1980–1990s in the works of D. Aerts, E. Finkelstein, A. Bukalov, J. Broekaert, S. Smets, E. Atmanspacher, P. Bordley and A. Khrennikov, E. Conte and others with publications in reputable journals. Experimental confirmation of the quantum interference effect and the existence of a wave function at the perceptual-cognitive level was obtained. Ambiguous figures, cognitive anomalies such as conjunctions of delusions, emotive-cognitive conflict, and observation of ambiguous figures after a cognitive task were used. Human behavior is explained by the quantum laws of superposition, interference, contextuality and incompatibility of non-commuting operators [1]. Biophysical concepts also developed: a living cell as a phonon quantum molecular biocomputer, and the brain as a system of such computers (E.A. Liberman); connections between consciousness and quantum mechanical vibrations in microtubules of the cell cytoskeleton (“the theory of quantum neurocomputing” by R. Penrose and S. Hameroff); electromagnetic quantum coherent framework of the body (S.P. Sit'ko); macroquantum subsystem in organisms, associated with biological molecular structures and processes; the existence of a minimal quantum of psyche and consciousness inherent in a single-celled organism (A.V. Bukalov) [3, 4]. The level of consciousness of a living being can be

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,

імунномодуючої 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. Тупіков, 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.

Мікроезикація еритроцитів є важливим процесом, який впливає на фізіологію та патологію організму. Дослідження мікроезикації еритроцитів може бути корисним інструментом для ранньої діагностики та моніторингу різних захворювань.

I. V. Gerasimchuk^{1,2,*} and V. S. Gerasimchuk²

ADSORPTION OF REAL POLYMER CHAINS IN THE SYSTEM WITH TWO METASURFACES IN A CONSTANT MAGNETIC FIELD

¹*Institute of Magnetism, National Academy of Sciences of Ukraine and Ministry of Education and Science of Ukraine, Vernadsky Blvd. 36b, Kyiv 03142, Ukraine*

²*National Technical University of Ukraine "Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute", Beresteisky Ave. 37, Kyiv 03056, Ukraine*

*Corresponding author, e-mail: igor.gera@gmail.com

The localization of polymer chains at metasurfaces is of great interest from both theoretical and technological standpoints because of its various applications. Penetrable metasurfaces (interfaces) reside in structured surfaces or in layered environments which can be formed in microphase separated block-copolymers, liquid crystalline or lipid systems. The understanding of polymers in environments of multiple metasurfaces (interfaces) and constant magnetic field can lead to novel applications for selection and recognition of polymer properties [1–4]. In the adsorbed state, conformations of localized chains are the result of the interplay between adsorption energy, entropy reduction because confinement in the adsorbed state, and the excluded volume repulsion between the monomers [5]. Only excluded volume of monomers leads to saturation effects at surfaces or interfaces. Thus, taking into account excluded volume effects is most important to understand the physics of real polymers close to metasurfaces.

In this work, we study the exact solutions for the problem of localization of real polymer chains with excluded volume interaction in the system of two attractive transparent metasurfaces (interfaces) within the mean-field approximation in an external magnetic field. An array of interfaces on nanostructured surfaces can be an example of such a system. At first, we introduce the model for the case of a single penetrable metasurface (interface) and after we present the exact solution for the case of two penetrable metasurfaces.

The total number of monomers in such systems is exactly calculated. The saturation values for the total number of monomers are found. We obtain a non-monotonic behaviour for the dependence of the number of adsorbed monomers on the distance between metasurfaces. Such a behaviour of the saturation density of polymers leads to the two-phase character of the dependence of free energy as a function of the number of adsorbed monomers. We find also the exact expressions for the total energy of the system and for the saturation value of the energy. We find the force acting between the attractive metasurfaces. At the saturation point, the force acting between the metasurfaces is strictly attractive and monotonously decaying towards zero for increasing metasurface distance.

1. G. W. Slater and S. Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **75**, 164 (1995).
2. J.-U. Sommer and A. Blumen, Phys. Rev. Lett. **79**, 439 (1997).
3. Yu. P. Rodin and Yu. M. Molchanov, Mechanics of Composite Materials **18**, 715 (1983).

4. J. Martin, M. Vazquez, M. Hernandez-Velez, and C. Mijangos, *Nanotechnology* **19**, 175304 (2008).
5. P. G. de Gennes, *Scaling Concepts in Polymer Physics* (Cornell University Press, Ithaca and London, 1979).

O. GNATYUK, M. OLENCHUK, A. TOLOCHKO, G. MONASTYRSKYI,
G. DOVBESHKO,

**SPECTRAL MARKERS OF LIPID MICRODOMAINS IN LIPOSOME MODELS
WITH DIFFERENT CHOLESTEROL AND SPHINGOMYELIN CONTENT**

*Department of Physics of Biological Systems, Institute of Physics, Natl. Acad. of Sci. of
Ukraine, Prospect Nauky, 46, Kyiv, Ukraine. e-mail: hrysantemka@gmail.com*

Current understanding of the lipid membrane structure is based on the theory of lipid microdomains on the membrane surface enriched with cholesterol and sphingolipids (lipid rafts) [1,2]. Such formations are characterised by a higher density and order structure. These rigid microdomains are distributed in a "sea" of more dynamic and less order glycerophospholipids with unsaturated acyl chains. Their physicochemical characteristics are determined by such parameters as temperature, sterol content, curvature, saturation, and length of fatty acid chains.

In this work, the formation of such lipid rafts in DOPC liposomes with different cholesterol and sphingomyelin contents was modelled. The model liposomes were prepared using a standard procedure involving the preparation of stock solutions of lipids in chloroform, mixing them in appropriate proportions, drying the chloroform followed by resuspension of the lipids in phosphate buffer, and sonication with alternating cycles of freezing in liquid nitrogen and thawing.

The ATR-IR spectra were recorded on an INVENIO-R spectrometer (Bruker) using the Bio-ATR attachment. All the recorded spectra were corrected for the baseline.

After analysing the spectra of the experimental samples, it can be concluded that the greatest differences in the structure of the model systems depending on the cholesterol content relate to phosphate groups and bending vibrations of CH. Changes in the average size of the obtained liposomes are discussed.

[1] Sezgin, E., Levental, I., Mayor, S. et al. The mystery of membrane organization: composition, regulation and roles of lipid rafts. *Nat Rev Mol Cell Biol* 18, 361–374 (2017). <https://doi.org/10.1038/nrm.2017.16>

[2] Inés Ripa, Sabina Andreu, José Antonio López-Guerrero, Raquel Bello-Morales. Membrane Rafts: Portals for Viral Entry. *Front. Microbiol., Sec. Virology, Volume 12 - 2021*, <https://doi.org/10.3389/fmicb.2021.631274>

Acknowledgement

This work was supported by National Research Fund of Ukraine Project "Biophysical and biochemical characteristics of metastatic circulating cells as potential targets of antimetastatic therapy" NRFU 2021.01/0229. O. Gnatyuk acknowledge Academy of Finland mobility project Decision number 358103 for financial support and G. Dovbeshko acknowledge Academy of Finland mobility project Decision number 359463.

O. GNATYUK¹, D. KOLESNYK², G. SOLYANIK², **S. HNATIUK¹**, G. DOVBESHKO¹
**SPECTRAL MARKERS OF SODIUM OXAMATE EXPOSURE ON LEWIS LUNG
CARCINOMA CELLS UNDER DIFFERENT INCUBATION CONDITIONS.**

¹ *Department of Physics of Biological Systems, Institute of Physics, Natl. Acad. of Sci. of Ukraine, Prospect Nauky, 46, UA-03028, Kyiv, Ukraine.*

² *Laboratory of Molecular and Cellular Mechanisms of Metastasis, R.E. Kavetsky Institute of Experimental Pathology, Oncology and Radiobiology, Kyiv, Ukraine.*

Presenting author e-mail: solomiagnatiuk@gmail.com

Modern approaches to understanding cancer include a metabolic approach. It is known that one of the main features of tumour cells is a switch in metabolic processes from oxidative phosphorylation in the mitochondria, which produces 30 molecules of ATP per 1 molecule of glucose, to aerobic glycolysis, which produces only two molecules of ATP per 1 molecule of glucose. Logically, cells that require more energy for their rapid growth and development should have an improved metabolism. But research shows that cancer cells use a less different pathway, namely aerobic glycolysis. This may be due to the need of tumour cells to obtain other by-products during the reactions. This process of aerobic conversion of pyruvate to lactate in combination with the oxidation of the cofactor nicotinamide is catalysed by lactate dehydrogenase (LDH). Therefore, LDH inhibition may be one of the targets of anticancer therapy [1]. Experimental evidence suggests that LDH inhibition induces apoptosis in cancer cells by increasing the level of reactive oxygen species. One of the classical LDH inhibitors is sodium oxamate.

In this study, we investigated the spectral markers of sodium oxamate effect on Lewis lung carcinoma (LLC) cell cultures under different types of incubation - adherent and de-adherent. In the second case, we model the process of metastasis. The infrared spectra of tumour cells were recorded on a Bruker INVENIO-R spectrometer using the Bio-ATR attachment. For this study, LLC cells were incubated with sodium oxamate for one day, after which they were washed from the culture medium, plated on the working surface of the Bio-ATR and dried in the cuvette chamber of the device at room temperature. After registration, the spectra were normalised to the Amide A band at 3288 cm⁻¹ and the baseline was corrected.

A fundamental difference in the spectral markers of the effect of sodium oxamate on cells cultivated in different ways was shown. Specifically, in LLC cells undergoing non-adherent growth, the largest spectral differences are observed in the region of valence symmetric and asymmetric vibrations of phosphate molecular groups of nucleic acids, and the presence of additional metabolites not present in the control was detected. In the case of standard adherent growth of LLC cells, the largest changes in the spectra are recorded in the region of valence vibrations of CH molecular groups, which is attributed to the cell membrane, and in the region of nucleic acid absorption, markers of different DNA conformations are observed.

[1] Kolesnik, D., Prokhorova, I., Pyaskovskaya, O., & Solyanik, G. (2023). Effect of lactate dehydrogenase inhibition by oxamate on lewis lung carcinoma cells with different metastatic potential. *Experimental Oncology*, 45(2), 242–251.

Acknowledgement

This work was supported by National Research Fund of Ukraine Project "Biophysical and biochemical characteristics of metastatic circulating cells as potential targets of antimetastatic therapy" NRFU 2021.01/0229

Ю.П.Горго¹, І.О.Грецький², О.М.Громозова², В.В.Невгад¹
**УМОВИ ПРОВЕДЕННЯ МОНІТОРИНГУ ЗМІН ІНТЕНСИВНОСТІ
ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ *P. PHOSPHOREUM***

¹Національний технічний університет України "КПІ" ім. Ігоря Сікорського,
yugorgo@ukr.net

²Інститут мікробіології та вірусології ім. Д.К.Заболотного НАН України

Використання мікробіологічних біосенсорів для моніторингу геомагнітної активності дає змогу дослідити різні біологічні ефекти під час варіацій геомагнітного поля та для біотестування дії неіонізуючого ЕМВ. Датчики з біолюмінесценцією бактерій привертають особливу увагу, оскільки люмінесценція є ферментативним процесом, пов'язаним із загальним метаболізмом клітини, який реагує на зміни навколишнього середовища. Проте вивчення специфічного впливу геомагнітного поля на інтенсивність бактеріальної люмінесценції вимагає автоматизованих тривалих паралельних вимірювань в реальному часі і в єдиному просторі.

Метою роботи є розробка умов проведення моніторингу змін інтенсивності люмінесценції *Photobacterium phosphoreum* IMV В-7071 для співставлення з одночасним моніторингом флуктуацій геомагнітного поля.

В ферментері використано штам морських бактерій *P. phosphoreum*, здатних до світіння. Культивування люмінесцентних бактерій проводили на щільному поживному середовищі наступного складу (г/л): пептон - 5,0; дріжджовий екстракт - 1,0; NaCl - 30,0; Na₂HPO₄ - 5,3; KН₂PO₄ x 2H₂O - 2,1; (NH₄)₂HPO₄ - 0,5; MgSO₄ x H₂O - 0,1; гліцерин - 3,0 мл / л, агар - агар - 20 г/л, вода дистильована - до 1 л, рН 7,6. В ферментері використовували добову культуру мікроорганізмів, вирощену на твердому поживному середовищі та поміщену в світлозахисний термостат. Проте вивчення інтенсивності бактеріальної люмінесценції цим методом дозволяло вимірювати біолюмінесценцію за незначні проміжки часу.

При визначенні довготривалого вимірювання інтенсивності біолюмінесценції культури бактерій було досліджено залежність біолюмінесценції від зміни температури, рН поживного середовища, концентрації NaCl та культивування на синтетичному і гелевому середовищах. Відмічено, що максимальний рівень світіння спостерігався в діапазоні температур від 10 до 28⁰С і рН від 5,5 до 9,1. У разі підвищення температури вище 28⁰С чи зміни рН середовища відзначено значне зниження світіння, а у разі досягнення 35⁰С спостерігали необоротну втрату люмінесценції. Для довготривалих вимірів були рекомендовані умови стандартизації поживного середовища з параметрами: рН = 7,6; t = 20⁰С. Було проведено визначення умов стабілізації вимірів шляхом вибору об'єму та кількості клітин досліджуваної суспензії люмінесцентних бактерій. Оскільки кисень є фактором стабільності прояву фонові люмінесценції бактерій, було з'ясовано, що кількість його у пробі визначає вибір об'єму проби та оптичної густини суспензії. При дослідженнях суспензії на фотолюмінетрі було визначено, що для довготривалого вимірювання інтенсивності біолюмінесценції доцільно використовувати суспензії об'ємом 3 мл з оптичною густиною 0,1 (670 нм).

Комплекс для безперервного культивування бактерій *P. phosphoreum* складається з культиватора, допоміжної системи безперервної доставки та забору культуральної рідини у вигляді системи трубок, насосу та ємності з поживним середовищем, що дозволяє проводити перекачку поживного середовища в

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 В-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 наночастинки, 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

вплив. Одним із варіантів вирішення цього завдання вважається використання мікрокапсул, які здійснюють викид ліків лише поблизу хворого органу або навіть клітини. Цього можна досягти, змінюючи проникність стінок капсули за допомогою зовнішніх впливів, зокрема використовуючи феромагнітні частинки, занурені у її стінки. Тоді теоретично можна змінювати проникність стінок, прикладаючи змінне магнітне поле.

Запропоновано та реалізовано на практиці механізм зміни проникності стінок мікрокапсул магнітними полями малої частоти.

G.Dovbeshko^{1,2}, O.Gnatyk^{1,2}, V.Boiko^{1,2}, N. Krysanova^{1,3}, N.Pozdnyakova³, W.Strek¹,
T.Borisova^{1,3}

POLLUTION FROM CARBON-METAL NANOHYBRIDS RESULTING FROM WAR POSES HEALTH HAZARD

¹ *Institute of Low Temperature and Structure Research, Polish Academy of Sciences, Wroclaw, Po-land, ul. Okólna 2, 50-422 Wroclaw, matinelli@gmail.com, v.boiko@intibs.pl*

² *Institute of Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Nauky prospect 46, Kyiv, Ukraine, 03028, hrysantemka@gmail.com*

³ *O. V. Palladin Institute of Biochemistry of the National Academy of Sciences of Ukraine, 9 Leonto-vicha Street, Kyiv, Ukraine 01054, tatianabiochem@gmail.com, krysanova@biochem.kiev.ua*

The report is about modelling the process of air pollution with particulate matter (PM), that occur in Ukraine, where increased with war activities. . Drastic increases in pollution from bombing and structural fires, raise additional health concerns [1].

Hostilities are accompanied with metal pollutants e.g. cooper and iron that are neurotoxic. Calculations have revealed that Ukrainian regions are highly contaminated with copper, iron, and sulfur-containing compounds that become bioavailable. Neurological disorders are the third most common cause of disability and death and their stable increase is linked to air pollution with PM. War-associated post-traumatic neurological syndrome is inherent to Ukraine and will exist for a long time during country recovery [2].

Here we analyze molecular structure of pollutants, e.g. FTIR and Raman spectroscopy, fluorescent, and membrane-active properties of war-derived polluted nanohybrids composed of carbon-containing smoke nanoparticles, copper and sulfur compounds and do correlation with potential neurotoxicity.

References

1. Galyna Dovbeshko and Tatiana Borisova. War-derived air pollution nanohybrids and their membrane-active properties, *Fizyka Nyzkykh Temperatur/Low Temperature Physics*, 2024, Vol. 50, No. 3, pp. 205–209.
2. Tarasenko, A., Pozdnyakova, N., Paliienko, K. et al. A comparative study of wood sawdust and plastic smoke particulate matter with a focus on spectroscopic, fluorescent, oxidative, and neuroactive properties. *Environ Sci Pollut Res* 29, 38315–38330 (2022). <https://doi.org/10.1007/s11356-022-18741-x>

Funding/ Acknowledgement

Project “War-derived air pollution nanohybrids composed of carbon-containing smoke nanoparticles and metal compounds: FTIR/Raman spectroscopic, fluorescent and

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 низці патологій, 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/BIOMD0000000070>). 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

effective application of NaFeO_2 nanoparticles in magnetic hyperthermia and remote temperature control.

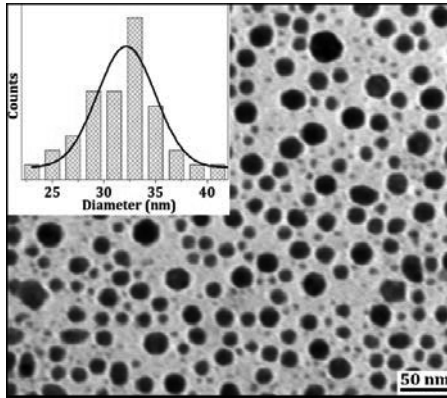


Fig. 1. A fragment of a microphotograph of NaFeO_2 nanoparticles. Inset shows the diagram of MNP size distribution.

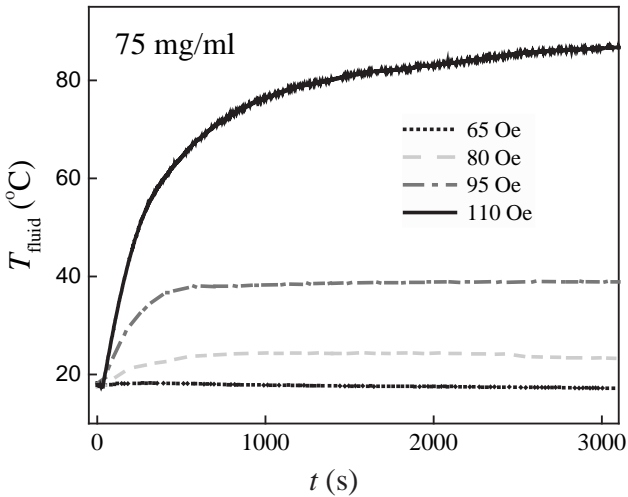


Fig. 2. Time dependence $T_{\text{fluid}}(t)$ for a fluid temperature at heating by an AMF of different amplitudes H_0 .

- [1] A. E. Deatsch, B. A. Evans, Heating efficiency in magnetic nanoparticle hyperthermia, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 354 (2014) 163-172
- [2] L. Lartigue, P. Hugounenq, D. Alloyeau, S. P. Clarke, M. Levy, J.-C. Bacri, R. Bazzi, D. F. Brougham, C. Wilhelm, F. Gazeau, *ACS Nano* 6 (12) (2012) 360 10935-10949.
- [3] W. Wu, Z. Wu, T. Yu, C. Jiang, W.-S. Kim, s, *Science and Technology of Advanced Materials* 16 (2) (2015) 023501.
- [4] T. Kobayashi, *Cancer hyperthermia using magnetic nanoparticles*, *Biotechnology journal* 6 (11) (2011) 1342-1347.

O.A. Zhytniakivska, U.K. Tarabara, K.O. Vus, V.M. Trusova, G.P. Gorbenko
DECIPHERING THE MOLECULAR DETAILS OF INTERACTIONS BETWEEN
HEAVY METALS AND BETA-LACTOGLOBULIN: MOLECULAR DOCKING
STUDY

*Department of Medical Physics and Biomedical Nanotechnologies, V.N. Karazin Kharkiv National University, 4 Svobody Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine;
olga.zhytniakivska@karazin.ua*

Due to its widespread accessibility and exceptional functional and nutritional attributes, beta-lactoglobulin, a whey protein, has garnered extensive application across various domains, spanning from food and nutrition to biomedicine and environmental monitoring. Its capacity to selectively bind heavy metal ions renders it particularly promising for several purposes: i) as a component in biosensors for heavy metal detection; ii) in the development of hybrid membranes for the removal of heavy metals from contaminated water sources; and iii) as carriers facilitating the targeted delivery of essential metals to specific tissues or cells. The formulation of lactoglobulin-based nanosystems tailored for heavy metal detection and/or targeted delivery necessitates a comprehensive understanding of the protein's metal-binding capabilities. Such insights are crucial for optimizing the design and efficacy of these nanosystems in diverse applications, underscoring the pivotal role of beta-lactoglobulin in advancing technologies addressing heavy metal pollution and biomedical interventions.

Given this, in the present study, the molecular docking technique was employed to evaluate the interactions between beta-lactoglobulin and 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. The three-dimensional X-ray crystal structure of the beta-lactoglobulin (isoform A) was obtained from the Protein Data Bank using PDB ID 1QG5. The docking of the metal ions with the protein was performed using a web-based metal ion-binding site prediction and docking server (<http://bioinfo.cmu.edu.tw/MIB/>).

Beta-lactoglobulin consists of 162 amino acids with a molecular weight of approximately 18.4 kDa, forming a calyx structure comprised of eight standard antiparallel β -sheets and one α -helix on the outer surface of the barrel. It was found that essential and toxic heavy metals bind to multiple binding sites of beta-lactoglobulin interacting with both the internal cavity of the β -barrel and the outskirts of the β -barrel. More specifically, the docking results indicate that all essential heavy metals tend to interact presumably with the same protein residues such as Asp 28 (Cu^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+}), Asp 96 and Asp 98 (Fe^{3+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+}), Glu 89 (Fe^{3+} , Mg^{2+} , Zn^{2+}), Glu 134 (Cu^{2+} , Co^{2+}), Glu 74 (Cu^{2+}), Lys 75 (Cu^{2+}), Gln 35 (Cu^{2+} , Fe^{3+} , Mg^{2+}), Asp 137 (Cu^{2+} , Fe^{3+}), Ala 34 (Mg^{2+} , Zn^{2+}) and Lys 32 (Zn^{2+}). Our docking results indicate that beta-lactoglobulin exhibited high selectivity towards heavy metal ions as the interacting residues varied significantly for different ions. Highly toxic heavy metal ions of Hg^{2+} and Au^{2+} were found to interact with non-polar amino acid residues Cys 106, Val 118, Cys 119, Cys 121, Leu 117 and Leu 122 of a calyx. In turn, the binding of the Cd^{2+} was governed presumably by the interactions with the charged residue Glu 127, Asp 128, Glu 131, Lys 135, Glu 51, Asp 53, and Glu 74. Considering our docking results, the lead (II) ions interact with the CD and EF strand-connecting loops of the calyx of beta-lactoglobulin and are surrounded by the residues Glu 51, Gly 52, Asp 53, Glu 74, Asp 98, and Glu131.

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

регуляції, що забезпечують глікемічний статус організму, але й весь комплекс процедур, пов'язаний з процесом отримання вимірювань, в якому передбачена можливість імітації дискретності, неточності, запізнення при отриманні даних. Така схема моделювання дозволяє вирішувати різноманітні ситуаційні завдання керування.

Прості моделі дозволяють здійснити попередній синтез оптимальних алгоритмів аналітичними методами. При цьому якщо передбачається отримання безперервних вимірювань, проводиться синтез алгоритмів зі зворотним зв'язком методом аналітичного конструювання. За відсутності такої можливості синтезуються алгоритми програмного керування за використання принципу максимуму. Отримані оптимальні алгоритми випробовуються на моделі, що імітує реальний об'єкт, який перебуває в патологічному стані. Працездатність запропонованих алгоритмів адаптивного керування перевірялася в модельному експерименті з метою вивчення впливу на якість керування величини інтервалу запізнення, частоти та неточності надходження вимірів. Проведений аналіз та імітаційне дослідження синтезованих алгоритмів в мінливих умовах вимірювань і впливів зовнішнього середовища показали доцільність використання в контурі зворотного зв'язку адаптивних алгоритмів, які здатні під них підлаштовуватись.

Т.А. Кобзар, Т.В.Крячок, П.В.Чалий

СТРЕСОСТІЙКІСТЬ VS ПСИХОСОМАТИКИ

Україна, м.Київ, Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій та систем НАН та МОН України, e-mail: kobzarta@ukr.net

Беручи до уваги вчення про конституційні типи (КТ) людини [1], які є поєднанням ряду морфологічних, фізіологічних та психологічних ознак; дані персонального та сімейного анамнезів; особливості вікової періодизації з відповідною домінуючою нейроендокринною віссю та феноменом вікової кризи; нейробиологічні особливості індивіда, що визначаються за шкалами, а також результати аналітичного огляду літературних джерел, що вказують на притаманну кожному КТ відповідної реактивності зі схильністю до певних захворювань [2], ми дійшли висновку, що всі перераховані фактори є основними чинниками стресової вразливості та підґрунтям, яке визначає індивідуальні засади стресостійкості (СС). Саме їх було взято нами за основу маршрутної карти для визначення індивідуального конституційного профілю, який апріорі вказує на слабкі місця в конституції, що можуть бути першочергово задіяні в патогенезі стрес-індукованих розладів [3].

Шляхом аналізу існуючих класифікацій КТ було визначено опірні маркери КТ. Для цього проводиться: 1.соматотипування за даними антропометричних вимірювань, де маркером є пропорції тіла у їх співвідношеннях; 2. фенотипування за індексом маси тіла, де маркером є вага тіла і зріст.

На основі аналізу персонального і сімейного анамнезу розроблено підходи до визначення вірогідної провідної ланки в патогенезі. Проведено аналіз існуючої класифікації ВООЗ за віком з урахуванням феномену вікових кризових періодів та домінуючої нейроендокринної вісі для кожного вікового періоду, що є нормативним процесом для поступального особистісного розвитку.

Розроблено алгоритм дослідження контингенту наукових працівників у віковому та гендерному аспекті на наявність функціональних та органічних порушень органів та систем у взаємозв'язку з типом їх конституції та стресостійкістю. Для цього буде проведено соматотипування, визначення біологічного віку, а також використано ряд шкал і опитувальників: авторський анамнестичний опитувальник; тест Г. Айзенка на визначення типу темпераменту; методика самооцінки психічних станів за Г.Айзенком; методика визначення стресостійкості та соціальної адаптації Холмса і Page; коротка шкала тривоги, депресії та посттравматичного стресового розладу (ПТСТР); госпітальна шкала тривоги та депресії (HADS); опитувальник здоров'я RHQ-15.

Оцінювання СС індивідів у взаємозв'язку з особливостями КТ людини дозволить зрозуміти механізми формування функціональних та органічних порушень органів та систем, знання яких є важливим для персоналізованого керування станами, де стрес є провокуючим фактором.

Література:

1. Кульчицький К.І. Анатомія людини. Конституціональні типи. URL: <https://medical-enc.com.ua/konstitutsionalnye-tipy.htm> (дата звернення: 08.10.2023).
2. Конституційні типології характеру Е. Кречмера, У. Шелдона. URL: <https://studfile.net/preview/1725943/page:34/> (дата звернення: 08.10.2023).
3. Patarca-Montero, R., Manu, P. (2020). The Psychopathology of Functional Somatic Syndromes: Neurobiology and Illness Behavior in Chronic Fatigue Syndrome, Fibromyalgia, Gulf War Illness, Irrit. Routledge. 2020. 315 p.

G. I. Kovtun^{1,2}, D. Casas², T. Cuberes²

SCANNING PROBE MICROSCOPY OF POLYVINYL ALCOHOL/CHITOSAN FILMS

¹*Ukraine, Kyiv, Institute of Magnetism NAS of Ukraine and MES of Ukraine, anna-kovtun@ukr.net*

²*Spain, Almadén, Mining and Industrial Engineering School of Almadén, University of Castilla-La Mancha*

Blends of chitosan and polyvinyl alcohol (PVA) are attracting a lot of attention in order to produce new materials for biomedical and industrial applications, such as drug delivery systems, wound dressings, sensor materials, packaging applications, etc. The structure of polymer matrices plays an important role in the creation of materials with controlled properties. Surface topography is known to substantially influence the properties of a material, such as adhesion, adsorption, optical response, biocompatibility, etc. Atomic force microscopy (AFM) constitutes a unique tool to provide information on the materials properties on the nanoscale: measurement of the surface topography with nanometer scale resolution, the mechanical, electrical, magnetic, or frictional response of nanomaterials or nanoscale material domains. AFM procedures based on the use of ultrasound, ultrasonic force microscopy (UFM), have already demonstrated the capability to differentiate nanoscale regions on the basis of their elastic and adhesive properties, as well as to provide subsurface materials information [1, 2].

In this work PVA/chitosan films were prepared by solution casting method and studied by thermogravimetric analysis (TGA), AFM, UFM and lateral force microscopy (LFM) and the results were compared to those of pure PVA and pure chitosan films. The surface of PVA/chitosan blends consists of small, rounded clusters of about 40 nm size and random pores, but in contrast to the individual component films, inhomogeneous features were observed on the surface, in the form of relatively large higher clusters, which gave rise to lower elastic and frictional contrast. The surface topographic height varies approximately from 0 to 6 nm; however, at the aforementioned features it reaches about 15 nm. In addition, UFM and LFM revealed the presence of softer and lower friction regions which could not be distinguished in the topographic images (Fig. 1). Such areas may be related to the formation of a new different phase as a result of PVA-chitosan interactions.

Thermal transformations of PVA/chitosan blend occur in 4 stages similarly to pure PVA film, but mass losses and positions of peaks on the derivative thermogravimetric curve change a little bit. It is shown that PVA/chitosan blend contains more adsorbed water in comparison to pure PVA film. The temperature at the onset of decomposition of the blend increases to 252 °C in comparison to 241 °C for PVA and 245 °C for chitosan. So, TGA confirmed an increase in the thermal stability of the PVA/chitosan blend compared to the individual component films.

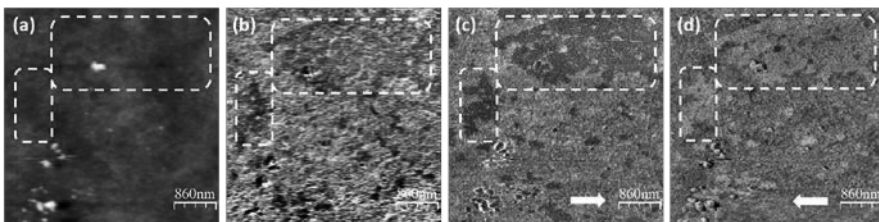


Fig. 1. (a) Contact-mode AFM surface topography, (b) UFM recorded immediately after (a) over the same surface area and (c, d) LFM recorded scanning from left to right (c) and from right to left (d) for PVA/chitosan film.

References

1. S. Marino, G. M. Joshi, A. Lusuardi, M. T. Cuberes, *Ultramicroscopy*, V. 142, 2014, P. 32-39.
2. M. T. Cuberes, in *Applied Scanning Probe Methods XI. Nanoscience and Technology*. Berlin, Heidelberg: Springer, 2009.

Я. П. Лазоренко, В. П. Міцай

ФЛУОРЕСЦЕНЦІЯ ПЛІВОК ПОРИСТОГО КРЕМНЕЗЕМУ З ІМОБІЛІЗОВАНИМ КУМАРИНОМ 1 АБО КУМАРИНОМ 4 ПРИ СОРБЦІЇ ЕНДОГЕННОГО АЦЕТОНУ З ПОВІТРЯ ВИМІРЯНА ПОРТАТИВНИМ АНАЛІЗАТОРОМ

Інститут Магнетизму НАН України та МОН України, Україна, Київ

e-mail: lazorenko85@gmail.com

Кількісне визначення метаболітів-біомаркерів у видихуваному повітрі людини є перспективним для неінвазивної діагностики і моніторингу захворювань людини.

Складність задачі обумовлена багатокомпонентністю видихуваного повітря, дуже низькими концентраціями метаболітів, високою вологістю. Наприклад, для хворих на діабет спостерігається підвищення рівня видихуваного ацетону понад 1.8 ppm (молекул на мільйон) [1]. Цікавим рішенням даної проблеми з точки зору практичного застосування може бути використання флуоресцентних сенсорів, особливо завдяки високій чутливості флуоресцентних методів аналізу і компактним розмірам. В наших попередніх роботах [2] було виявлено гасіння флуоресценції флуорофору кумарину 4, імобілізованого в плівках пористого кремнезему, при взаємодії з молекулами ацетону, адсорбованими з повітря. Метою даної роботи було створення портативного флуоресцентного аналізатора ендogenous ацетону і виявлення з його допомогою флуоресцентних відгуків сенсорних плівок на мікроконцентрації ацетону в модельних сумішах видихуваного повітря.

В якості зразків сенсорних плівок досліджувались плівки мезопористого кремнезему з імобілізованими органічними флуоресцентними барвниками кумарином 1 (7-диетиламіно-4-метилкумарин) або кумарином 4 (7-гідрокси-4-метилкумарин). Плівки створювались закріпленням переважно моношару частинок силікагелю на скляній підкладці тонким шаром лужного розчину силікатів натрію і калію з подальшою дегідратацією. Модельні суміші видихуваного повітря синтезувались статичним об'ємним методом отримання градувальних газових сумішей.

Розроблено і виготовлено портативний флуориметричний аналізатор ацетону з плівковими чутливими елементами. На основі спектрометричних вимірювань досліджуваних плівкових зразків для аналізатора було обрано довжини хвиль збудження флуоресценції біля 360-370 нм і реєстрації – від 420 нм і більше. В якості джерела збудження використовувався УФ-світлодіод, в якості фотоприймача – фотодіод, з відповідними світлофільтрами. Зразки розміщувались в кварцовій комірці аналізатора, через яку під час вимірювання вмикалось прокачування 1 л модельної суміші видихуваного повітря. Сигнал з фотодіода потрапляв на підсилювач і аналогово-цифровий перетворювач, з подальшою передачею з мікроконтролера на комп'ютер в режимі реального часу за допомогою спеціально розроблених програм.

Вимірювання кінетики флуоресценції на створеному аналізаторі для плівок з кумарином 1 і кумарином 4 показали зміну інтенсивності флуоресценції при абсорбції молекул ацетону в області 0-10 ppm, яка була пропорційна до концентрації. При прокачуванні чистого повітря відбувалось відновлення флуоресценції. Для зразків з кумарином 1 зміни склали від 0.09% до 0.25%, з кумарином 4 від 2.7% до 3.7%, для 2.5 ppm і 10 ppm відповідно. Середньоквадратична похибка оцінюється у 12.9% для N = 5 вимірів для 10 ppm. Зміна флуоресценції молекул органічних барвників пояснюється динамічним гасінням флуоресценції, викликаним утворенням ексиплексів з молекулами ацетону.

[1] M. R. Jadhav, P.R. Wankhede, S. Srivastava, H. N. Bhargaw, and S. Singh, *Diabetes Metab. Syndr.: Clin. Res. Rev.* 18(1), 102931 (2024).
<https://doi.org/10.1016/j.dsx.2023.102931>.

[2] V. P. Mitsai, Ya. P. Lazorenko, A. G. Misyura, and S. O. Mamilov, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii* 19(4), 941 (2021).
<https://doi.org/10.15407/nnn.19.04.941>.

Д. А. Лядов, В. П. Берест

ВИКОРИСТАННЯ ПІДХОДІВ МІКРОФЛЮЇДКИ У МЕДИЧНІЙ ДІАГНОСТИЦІ

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

Мікрофлюїдка дозволяє маніпулювати рідинами в мікромасштабі. Ця технологія має великий потенціал у сфері діагностики прихованих патологій. Основна ідея полягає в створенні мікроскопічних каналів, які можуть точно керувати рухом рідини. Це може бути використано для створення мікро-лабораторій, які можуть проводити широкий спектр тестів на невеликій кількості біологічного матеріалу, зокрема такого як кров або слина. Ці “лабораторії на чіпі” можуть бути використані для швидкого виявлення різних типів патологій, включаючи рак, серцеві захворювання та інфекційні хвороби. Вони також можуть бути використані для моніторингу перебігу хвороби та відповіді на лікування в реальному часі, а також бути інструментом персоналізованої медицини та “point of care” діагностики.

Однією з важливих характеристик клітин яка визначає їх поведінку у мікропоточці є поверхневий заряд. Відомо, що еритроцити несуть негативний поверхневий заряд ≈ 15 мВ, який відіграє вирішальну роль у їх взаємодії та поведінці в мікрофлюїдних середовищах. Цей поверхневий заряд може впливати на агрегацію еритроцитів, при цьому електростатичне відштовхування між поверхнями клітин діє на відстані 20 нм і більше. Поверхневий заряд еритроцитів з одного боку може впливати на функціонування еритроцита, а з іншого свідчити про наявність певних патологій. Відомо, що зміни поверхневого заряду можуть впливати на механічні властивості еритроцитів, наприклад, механічна реакція штучно затверділих глутаральдегідом еритроцитів, що протікають через мікрофлюїдний канал, напряму залежить від складу та архітектури мембрани еритроцитів. Такий підхід дозволяє відрізнити вплив змін площі поверхні мембрани еритроцитів від змін деформованості мембрани еритроцитів.

Маніпулювання зарядом клітинної поверхні для медичних застосувань є багатообіцяючою сферою досліджень для клітинної терапії, регенеративної медицини та діагностики захворювань. Один підхід передбачає хімічні кон'югації та полімерну інкапсуляцію. Ці методи дозволяють прикріплювати різні функціональні групи до поверхні клітини, таким чином змінюючи її заряд. Це може вплинути на те, як клітини взаємодіють одна з одною та зовнішнім середовищем, потенційно підвищуючи їх терапевтичну ефективність. Розроблено методи негенетичної модифікації клітинної поверхні, щоб обійти обмеження генетичної модифікації: гідрофобне введення, ферментативне та метаболічне додавання. Ідеальні методи інженерії клітинної поверхні повинні забезпечувати контроль над станом та функціонуванням модифікованих клітин, не перешкоджаючи їх виживанню, проліферації та клітинній активності. Маніпуляції зарядом поверхні клітини вже мають низку застосувань у медицині. Наприклад, мезенхімальні стовбурові клітини, еритроцити і макрофаги можуть бути пристосовані для транспортування діагностичних молекул або терапевтичних агентів. У регенеративній медицині маніпуляції зарядом поверхні клітини можна використовувати для створення 3D-сферіодних конструкцій для тканинної інженерії. Зміни поверхневого заряду клітин можуть свідчити про певні захворювання, а моніторинг цих змін може допомогти в

діагностиці захворювання. Наше експериментальне устаткування використовує наближення мікрофлюїдики для визначення дзета-потенціалу клітин. Отримано розподіл величин цього показника в популяції еритроцитів здорових донорів та знайдено можливість визначення внеску факторів сироватки крові у зміни розподілу дзета-потенціалу в експериментальному зразку. Розроблений нами спосіб визначення розподілу ζ -потенціалу в популяції клітин дозволить вивчати наслідки маніпуляції поверхневим зарядом клітини в медицині і буде використаний для розробки нових діагностичних і терапевтичних стратегій, персоналізованої медицини.

V.S. Martynyuk¹, O.M. Gromozova², I.O. Hretskyi², Yu.V. Tseyslyer¹

BIOLUMINESCENCE OF PHOTOBACTERIA *PHOTOBACTERIUM PHOSPHOREUM* IMV B-7071 UPON EXTREMELY WEAK MICROWAVE RADIATION

¹ *Institute of Biology and Medicine of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Ukraine E-mail: vittorio.martini.office@gmail.com*

² *D.K. Zabolotny Institute of Microbiology and Virology, NAS of Ukraine, Ukraine E-mail: gren.elen@gmail.com*

The bacterial bioluminescence reaction serves as an indicator of metabolic activity and functional state of bacterial cells. Therefore, the bioluminescent analysis is widely used for express assessment of biologically active and toxic substances. Bioluminescence of *Photobacterium phosphoreum* IMV B-7071 are changed upon influence of powered radiofrequency electromagnetic irradiation. But the sensitivity of photobacteria to extremely low-intensity microwave irradiation, both in terms of thermal and non-thermal effects, is unknown and remains a topic of discussion.

Objective. The aim of this study was to investigate the dynamics of bioluminescence in *Photobacterium phosphoreum* IMV B-7071 under the influence of microwave electromagnetic fields with a wavelength of 7.1 mm (42.2 GHz) and an intensity of 20 mW/cm². These millimeter radio waves share frequency and amplitude characteristics with those used in modern telecommunication technologies such as 5G and 6G standards, as well as in some therapeutic procedures.

Methods. Bioluminescence studies were conducted in liquid media of standard composition in Petri dishes with a diameter of 5 cm. The height of the liquid bacterial suspension in the Petri dishes was 5 mm. The basic background glow was examined, and bioluminescence was recorded digitally for further image processing using ImageJ. Temperature measurements were taken inside the suspension and at its bottom using a thermocouple with an accuracy of 0.1°C. Surface temperature of the bacterial suspension was measured using a Thermal Imaging Camera (Topdon Tc001) with an accuracy of 0.1°C.

Results. The study results demonstrate that the intensity of bioluminescence in aqueous solutions gradually increases in *P. phosphoreum*, peaking at approximately 2 days before slowly diminishing. So, we investigated the impact of microwave radiation during these periods of peak luminosity. Our findings revealed a weak rise in the temperature of the bacterial suspension by 2-3°C at its center, where microwave radiation was applied via the waveguide during the one-hour exposure. Temperature elevation occurred within the first minutes, followed by stabilization. Importantly, the microwave radiation and resultant

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 ФЛЮОРЕСЦЕНЦІЇ 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 ендogenousний 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 –

молекула барвника кумарин 7 в матрицях адсорбатах, на молекули леткого аміаку отриманих за допомогою розробленого нами макета портативного флуоресцентного алізатора аміаку.

Макет аналізатора розроблявся за аналогією до принципу роботи флуориметра, в якості збуджуючого джерела випромінювання використовувався світлодіод з довжиною хвилі $\lambda_{\text{ф}}=450\text{nm}$. В макеті використано оранжевий світлофільтр (ОС-12) і пурпурний (ПС-11) світлофільтр, які забезпечили максимальну чутливість аналізатора до аміаку. Реєстрація флуоресценції відбувалася в діапазоні довжин хвилі 540-600nm. Оптичний сигнал флуоресценції зчитувався фотодіодом BPW21R, підсилювався підсилювач аналогового сигналу, після чого потрапляв на АЦП AD7793 і оброблявся мікроконтролером STM-32F103 та виводився за допомогою розробленого програмного забезпечення на екран ПК. Полімерні структури формували на скляних підкладках пошаровим способом. В якості полімерної матриці використовували полімер етиленвінілацетат (ЕВА) покритий шаром діоксиду кремнію. В якості сигнального елементу використовувався флуоресцентний комплекс барвника кумарину7 ($\lambda_{\text{ф}}=508\text{nm}$) з колоїдними напівпровідниковими нанокристаллами CdTe ($\lambda_{\text{ф}}=530\text{nm}$). Проводилося вимірювання кінетики інтенсивності флуоресценції зразка для таких концентрацій парів аміаку в повітряній пробі: 10ppm, 7,5ppm, 5ppm.

В результаті експерименту було отримано відгук зразка полімерних структур на вказані концентрації аміаку, що мав вигляд падіння інтенсивності флуоресценції зразка: для 10ppm аміаку інтенсивність флуоресценції зразка впала на 1,17% відносно вихідного сигналу, для 7,5ppm – впала на 1,04% а для 5ppm – впала на 0,61%. Отже, спостерігається збільшення величини падіння сигналу флуоресценції зразка при збільшенні концентрації аміаку в повітряній пробі.

- [1] S. Kumar, C. S. Kushwaha, P. Singh, K. Kanojia, and S. K. Shukla, *Sens. Diagn.* 2, 1256 (2023). <https://doi.org/10.1039/D3SD00067B>.
- [2] V. P. Mitsai, A. G. Misyura, S. V. Kryvets, and Ya. P. Lazorenko, *J. NanoElectron. Phys.*, 8(4), 04032-1 (2016). [https://doi.org/10.21272/jnep.8\(4\(1\)\).04032](https://doi.org/10.21272/jnep.8(4(1)).04032).

M. Olenchuk, O. Gnatyuk, G. Dovbeshko, G. Levchenko, G. Monastyrskyi, A. Tolochko
CAN 2D WS2 AND MOS2 NANOPARTICLES INFLUENCE ON FORMATION
AND PROPERTIES OF LIPOSOMES?

Institute of Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine,
contact email: m.olenchuk@yahoo.com

Liposomes are good model structures that resemble cell membranes in their properties and structure. They are used to study the effect of various substances and materials on the functioning or properties of the cell membrane. The effect of 2D WS2 and MoS2 nanoparticles on the properties and formation of liposomes was investigated using the methods of IR and Raman spectroscopy, dynamic light scattering and microscopy to determine the size of liposomes, and luminescence analysis.

To obtain liposomes 18:1 ($\Delta 9$ -Cis) PC (DOPC) 1,2-dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine Avanti Polar Lipids was used. The procedure of dissolving the lipids in chloroform was used, followed by resuspension in water and sequential freezing with liquid nitrogen and thawing. The concentration of liposomes in the resulting suspension was 4 mMol. 2D WS2 and MoS2 nanoparticles (Sigma Aldrich) have size 90 nm. They

were added in one case during the formation of liposomes (at the stage of dissolution in water), and in the second case - after the completion of the procedure. So, two types of samples were obtained - with nanoparticles inside the liposome and with nanoparticles on the surface of the liposome.

The size of liposomes depends on whether the nanoparticles were introduced at the stage of dissolution in water or after the completion of the procedure.

IR spectra revealed markers that are characteristic of liposomes synthesized with nanoparticles.

Luminescence from 300 to 400 nm was observed for liposomes. In the Raman spectra of liposomes with nanoparticles, the bands inherent to the nanoparticles are not observed, but the quenching of luminescence is observed. The luminescent properties of liposomes with nanoparticles inside the liposomes and liposomes with nanoparticles on the surface of the liposomes are different.

Acknowledgement

M. Olenchuk acknowledge NRFU project No 2021.01/0229 “Biophysical characteristics of circulating metastatic cells as potential targets of antimetastatic therapy”, O. Gnatyuk acknowledge Academy of Finland mobility project Decision number 358103 for financial support and G. Dovbeshko acknowledge Academy of Finland mobility project Decision number 359463.

М.М.Опаленик¹, О.М.Громозова², І.О.Грецький², Ю.П.Горго¹

РОЗРАХУНКИ КОРЕЛЯЦІЙ МІЖ НИЗЬКОЧАСТОТНИМИ ВАРІАЦІЯМИ ГЕОМАГНІТНОГО ПОЛЯ ТА РЕАКЦІЮ МЕТАХРОМАЗІЇ ВОЛЮТИНОВИХ ГРАНУЛ ДРІЖДЖІВ

¹*КПІ ім. Ігоря Сікорського, babka055@gmail.com, yugorgo@ukr.net*

²*Інститут мікробіології та вірусології ім.Д.К.Заболотного НАН України*

При дослідженнях реакції метакромазії волютинових гранул дріжджів визначено, що динаміка кольорових та структурних змін реакції зберігає високий ступінь подібності з варіаціями геомагнітного поля, особливо під час магнітних збурень та бур. Існує теорія, що ступінь впливу ГМП на біологічні об'єкти залежить від його інтенсивності, яка є найвищою при частотах геомагнітного поля <1Гц. Метою роботи були виявлення та розрахунки значень напруженості геомагнітного поля з частотами < 1Гц, за яких відмічаються суттєві зміни реакції метакромазії волютинових гранул дріжджів *Saccharomyces cerevisiae*. В роботі були використані щоденні значення реакцій метакромазії волютинових гранул дріжджів, проведені в моніторинговому режимі у 2009 р. в Інституті мікробіології та вірусології НАН України.

Для виявлення реальних значень напруженості геомагнітного поля на різних частотах було розроблено програму, яка реалізована на мові програмування R. Для роботи програми використано базову версію інтерпретатору R та додатково встановлено пакет “Seewave-1.7.6”, що може взаємодіяти із пакетами “fft” та “signal”, які дозволяють працювати з дискретними сигналами, в тому числі їх моделювати, фільтрувати, та проводити Фур'є перетворення. Всі пакети були вільно встановлені з репозиторіїв CRAN за допомогою команди `install.packages`. Програма дає змогу розраховувати флуктуації ГМП на вибраній частоті і в будь-якому вибраному періоді

добу під час незбурених станів геомагнітного поля та під час магнітних бур і передбачена адаптація програми до таких завдань.

Значення геомагнітного поля в регіоні Києва з частотою дискретизації 1 Гц за 2009 рік були отримані із даних магнітометричної обсерваторії (Демидів, Київська область) та Інституту геофізики НАН України (<http://www.igph.kiev.ua/>). Для подальшої обробки даних була обрана компонента X ГПЗ. Для обчислення значень напруженості ГМП при його варіаціях на низьких частотах було застосовано частотні фільтри 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001 Гц з програмного пакету “Seewave-1.7.6”.

Для отримання результатів порівнянь були використані щоденні похвилинні та сумарні добові значення напруженості геомагнітного поля у м. Києві в ті дні 2009 р., коли проводили реєстрацію значень реакції метахромазії волютинових гранул дріжджів *S. cerevisiae*. Були обчислені середні значення інтенсивності ГМП на частотах 0.1, 0.01, 0.001, 0.0001 Гц тривалістю в 1 годину в той період доби, коли проводилась реакція метахромазії волютинових гранул дріжджів. Відповідно, це дало змогу порівнювати біологічні та геофізичні дані в єдиному просторі та часі.

Проведено попередні дослідження впливу низькочастотних значень геомагнітного поля на реакцію метахромазії волютинових гранул в клітинах дріжджів. Для цього було проведено вибірку всіх днів за жовтень 2009 р., в які проводили дослідження реакції метахромазії волютинових гранул дріжджів, та сформовано масив їх кількісних значень. Крім того, було сформовано масив середніх одноденних значень інтенсивності ГМП на низьких частотах в ці ж дні та проведено їх кореляційний аналіз із визначеними кількісними значеннями змін реакції метахромазії. Отримані коефіцієнти кореляції між інтенсивністю ГМП на низьких частотах та даними реакції метахромазії волютинових гранул дріжджів склали в ці дні: $R = 0,31$ – на частоті 0.1Гц; $R = 0,37$ – на частоті 0.01Гц; $R = 0,41$ – на частоті 0.001Гц; $R = 0,69$ – на частоті 0.0001Гц. Отримані результати порівнянь свідчать, що збільшення коефіцієнту кореляції відбувається із пониженням частоти варіацій МПЗ. Крім того, отримані дані напруженості геомагнітного поля на частотах <1 Гц вкладаються в теоретичні розрахунки, що зі зменшенням частоти збільшується інтенсивність ГМП (з 0,03 нТл до 10 мкТл).

Виявлені суттєві впливи різкого збільшення напруженості геомагнітного поля на частоті 0.0001 Гц на зміни вираженості реакції метахромазії у волютинових гранулах дріжджів *Saccharomyces cerevisiae*. Подальші дослідження дадуть змогу отримати більш вагомі результати за весь період досліджень.

Остапенко¹ О.С., Мамілов² С.О., Бех¹ І.І.

ПРОТОТИП СИСТЕМИ ЗБИРАННЯ ТА ПЕРВИННОГО ОБРОБЛЕННЯ ДАНИХ ДЛЯ ВИМІРЮВАННЯ РІВНЯ ГЛЮКОЗИ У КРОВІ З ВИКОРИСТАННЯМ СПЕКТРОСКОПІ БЛИЖЬОГО ІЧ ДІАПАЗОНУ

¹ Україна, Київ, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, email: alexandraost@knu.ua, alexandraost2001@gmail.com

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

У світі з кожним роком стає все більше людей, які набувають хронічне захворювання — діабет. У дослідженні [1] вчені прогнозують збільшення вдвічі кількості хворих до 2030 року з порівняннi з 2000 роком. Один з видів — це

цукровий діабет, який виникає через нездатність організму справлятися з інсуліном. Для контролю якості життя та уникнення невідворотних наслідків, хворі на діабет мають проводити щоденний моніторинг рівня глюкози у крові за допомогою інвазійних систем [2], які потребують порушення цілісності верхнього покривного шару. Крім того, такий моніторинг є дорогим через необхідність застосування одноразових смужок з ферментами, що накладає обмеження на щоденне використання. Тому розробка неінвазійних методів вимірювання рівня глюкози значно б полегшила отримання результатів без механічних ушкоджень для пацієнтів з діабетом та людям з переддіабетним станом [3].

Огляд наявних розробок в цій галузі [4-11] виявив ряд недоліків, через які виникають сумніви щодо достовірності наведених в них результатів. По-перше, згадані вище роботи не містять даних про методику приготування розчинів глюкози, або ці розчини зроблені не коректно з точки зору фізіології. Зокрема, автори роботи [4] додають розчинник (воду) до сталої кількості речовини глюкози, що не відповідає біохімії процесу в людському організмі. По-друге, схемотехнічні рішення, які були вибрані для вимірювання фотоструму приймачів випромінювання, не є коректними з точки зору радіоелектроніки. По третє, оптичні модулі, використані в деяких роботах (наприклад, [5]), не мають захисту від зовнішніх джерел інфрачервоного (ІЧ) випромінювання, що може вносити істотні результати похибки у результати вимірювання.

Дана робота присвячена розробці та виготовленню прототипу системи збирання та первинного оброблення даних для вимірювання рівня глюкози у крові з використанням спектроскопії ближнього ІЧ діапазону з урахуванням попередніх зауважень. Для його побудови використано сучасну компонентну базу цифрової та аналогової електроніки. Основне завдання, яке виконує прототип - це реєстрація інтенсивності зворотно розсіяного світла інфрачервоного лазера (довжина хвилі 980 нм). Структурна схема прототипу наведена на рис. 1.

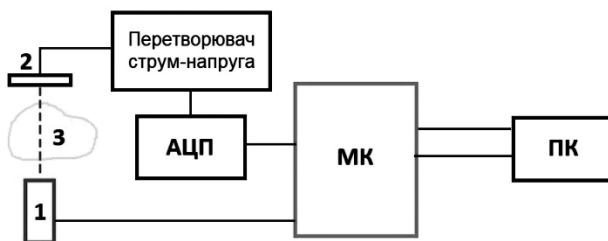


Рис. 1. Структурна схема прототипу:

1- ІЧ лазер, 2- фотодіод, 3 - біологічна тканина, АЦП - аналого-цифровий перетворювач, МК - мікроконтролер, ПК - персональний комп'ютер

Для перевірки працездатності виготовленого прототипу було проведено ряд вимірювань залежності інтенсивності зворотно розсіяного випромінювання від концентрації глюкози у водному розчині. На рис. 2 наведено графіки залежності інтенсивності фотоструму від концентрації глюкози, нормованої на значення, отримане для дистильованої води. Видно, що з ростом концентрації глюкози інтенсивність фотоструму швидко зменшується і, починаючи зі значення у 5% виходить на насичення. Отримані результати добре узгоджуються із даними, наведеними в [2].

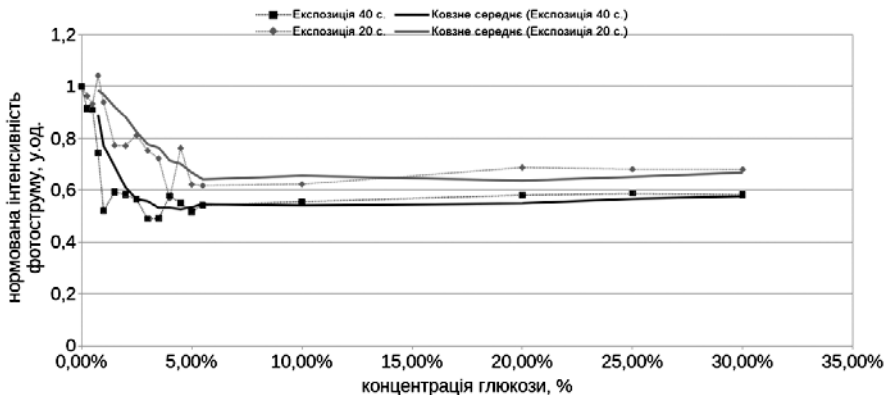


Рис. 2. Графіки залежності нормованої інтенсивності фотоструму від концентрації глюкози у розчині

1. Wild, S., Roglic, G., Green, A., Sicree, R., & King, H. (2004).. *Diabetes care*, 27(5), 1047-1053.
2. Yadav J, Rani A, Singh V, Murari BM. *Biomed Signal Process Control*. 2015; 18: 214-227.
3. Mamilov, S., Velyhotskiy, D., Yesman, S., Mysiura, A., Bekh, I., & Gisbrecht, A. In 2020 IEEE 40th International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO) (pp. 536-540). IEEE.
4. Muhammad Taufiq Bin Zainul 'Abidin, Mohd Khairul Ridhwan Rosli, Sarah Addyani Shamsuddin, Nina Korlina Madzhi, Mohd Firdaus Abdullah. (2013, November). Initial Quantitative Comparison of 940nm and 950nm Infrared Sensor Performance for Measuring Glucose Non-invasively. In 2013 ICSIMA
5. Mitra Mohd Addi. (2014, December) A Portable Non-Invasive Glucose Monitoring Device. In 2014 IEEE Conference on Biomedical Engineering and Sciences.
6. Duc Trinh-Minh Dinh, Viet Anh Truong, An Nhu-Phu Tran, Hieu Xuan Le, and Hien Thi-Thu Pham (2020, January). 7th International Conference on the Development of Biomedical Engineering in Vietnam (BME7), IFMBE Proceedings 69
7. Megha S. Asekar (2018). Proceedings of the Second International Conference on Intelligent Computing and Control Systems (ICICCS 2018)
8. Mohammed Shahriar Arefin, Adnan Hossain Khan, and Rabiul Islam In 2018 10th International Conference on Electrical and Computer Engineering
9. H. Ali, F. Bensaali, Senior Member, IEEE, F. Jaber, Member, IEEE (2017). Novel Approach to Non-Invasive Blood Glucose Monitoring based on Transmittance and Refraction of Visible Laser Light. In 2016 IEEE.
10. Aishwarya Lakshmi K, R Rashmi, Swetha Sadanand, Dr. C K Narayanappa, Dr N Sriram (2017, May). In 2017 IEEE, 2nd IEEE International Conference On Recent Trends in Electronics Information & Communication Technology (RTEICT).
11. Helena Cano-Garcia, Rohit Kshirsagar, Roberto Pricci, Ahmed Teyeb, Fergus O'Brien, Shimul Saha, Panagiotis Kosmas and Efthymios Kallos. *Sensors* 2021, 21, 3275

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.

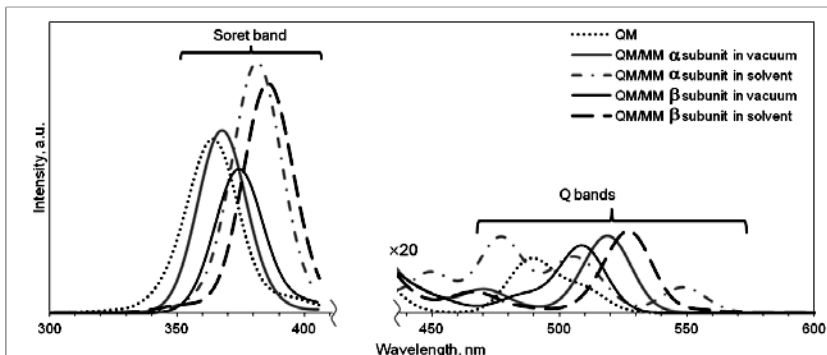


Fig.1 Calculated electronic excitation spectra for the three models of oxyhemoglobin: simplified structure without protein environment (pure QM), optimized structures in α and β subunits (QM/MM). Optical absorption spectra were obtained from vertical singlet-singlet $S_0 \rightarrow S_n$ transitions with Gaussian broadening with a width at half peak of 20 nm. Singlet-triplet excitations $S_0 \rightarrow T_n$ are not shown.

1. Schmidt M. W. *et al.* // J. Comput. Chem.-1993.-**14**.-P. 1347-1358.

2. Shoemaker J. R. *et al.* // J. Phys. Chem. A – 1999. -**103**.-P. 3245-3251.

Sliusarenko D. G. Ntreba A.V.

HYBRID APPROACH TO NOISE PROCESSING WITH INTEGRATION OF RESIDUAL CONNECTIONS INTO DAE

Faculty of Radiophysics, Electronics and Computer Systems, Taras Shevchenko National University of Kyiv. Volodymyrska Street, 64/13, Kyiv-01601, Ukraine.

E-mail: d.fulhem@gmail.com, avn@univ.kiev.ua

Currently, the role of noise and artifacts in medical images poses a significant challenge. Primarily, the presence of such disturbances complicates the accurate interpretation of images, leading to prolonged examination times for clinicians to understand the diagnosis [1].

Over the past decade, numerous methods for handling noise in images, including medical ones, have been considered. However, this topic remains relevant, as the issue of noise presence remains unresolved, and the world is still searching for methods that can make medicine more precise and efficient, thereby making it more accessible.

Neural networks, particularly DnCNN, ResNet, and U-Net, have gained significant popularity in tasks such as image reconstruction, enhancement, and denoising. DnCNN, designed specifically for denoising, improves upon traditional autoencoders by incorporating deep learning techniques. ResNet, characterized by residual connections, has also become widely used for its ability to handle noise effectively. U-Net, originally developed for segmentation tasks, has been adapted for denoising by leveraging its deep neural network architecture. Many other neural networks and their modifications were also created[2].

Idea is to combine the features of several different networks into a single unified one. We built a model that represents a slightly simplified version of DnCNN, which already shows pretty decent denoising results[3], with the addition of ResNet features aimed at

obtaining a high-quality autoencoder for high-resolution DICOM (Digital Imaging and Communications in Medicine) medical images. This model has demonstrated promising results in image restoration from noise types including Gaussian, Poisson, and impulse noises, which closely mimic real noise artifacts in medical images.

- [1] R. Morin and M. Mahesh, 'Role of Noise in Medical Imaging', *J. Am. Coll. Radiol.*, vol. 15, no. 9, p. 1309, Sep. 2018, doi: 10.1016/j.jacr.2018.07.003.
- [2] R. Patil and S. Bhosale, 'Medical Image Denoising Techniques: A Review', vol. 4, pp. 21–33, Jan. 2022, doi: 10.46328/ijonest.76.
- [3] D. Sliusarenko, A. Neteaba, and S. Radchenko, 'MRI Denoising Neural Network Architecture Convolution', in *2023 IEEE 12th International Conference on Intelligent Data Acquisition and Advanced Computing Systems: Technology and Applications (IDAACS)*, Sep. 2023, pp. 968–971. doi: 10.1109/IDAACS58523.2023.10348629.

В.О.Соколов, С.О.Мамілов

НЕЛІНІЙНИЙ ВІДГУК НА ЛАЗЕРНЕ ОПРОМІНЕННЯ ПОКАЗНИКА ЗАЛОМЛЕННЯ ЦИБУЛІ ГОРОДНЬОЇ (ALLIUM SEPA)

Україна, Київ, Інститут магнетизму НАН і МОН України

Кількісні дані про відгуки біологічних середовищ на лазерне опромінення являють собою не тільки науковий інтерес, але й мають практичне значення. Зокрема, нелінійна складова показника заломлення є чутливою до присутності хвороботворних мікроорганізмів, що вказує на можливість розробки нових методик своєчасного виявлення уражень продуктів рослинного походження під час зберігання. Досягнення прогресу в даному напрямку стане можливим лише при умові усунення руйнівного впливу розсіяного випромінювання, яке істотно зменшує співвідношення сигнал/шум при застосуванні традиційних методів вимірювання (з-сканування, просторової фазової само модуляції та ін.).

Для вирішення цієї проблеми був створений метод, в якому перетворення зміни показника заломлення Δn у величину, на яку світлорозсіяння впливає мало, а саме – у зміну центру тяжіння (ЦТ) спектру випромінювання $\Delta \lambda_{\text{ЦТ}}$. Сенсор, що здійснює таке перетворення, по суті являє собою напівпровідниковий перестроюваний лазер з зовнішнім зворотним зв'язком (333) (див. Рис.1).

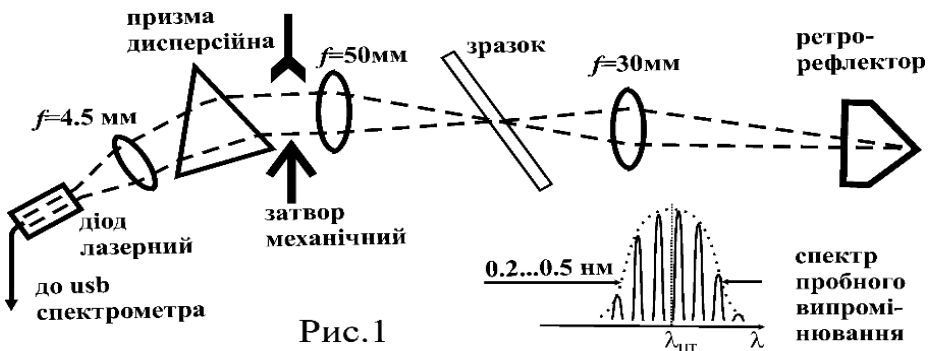
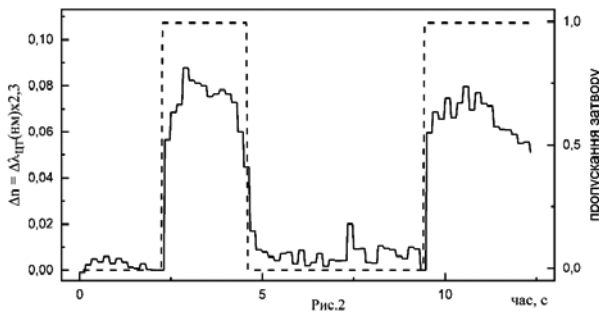


Рис. 1

Система 333 включає досліджуваний зразок у вигляді плівки, що розміщується в перетяжці, дисперсійну призму, завдяки якій утворюється резонанс, і механічний затвор, який вмикає та вимикає зворотний зв'язок. Зміна показника заломлення призводить до зсуву положення резонансу, а відтак – до зміни ЦТ спектру випромінювання. Визначивши $\Delta\lambda_{ЦТ}$ експериментально, величину Δn можна розрахувати згідно виразу $\Delta n = 2fD_{\phi} (n_0^2 - \sin^2\alpha)^{3/2} / (n_0 d \sin 2\alpha) \cdot \Delta\lambda_{ЦТ}$, де f - фокусна відстань лінзи, що знаходиться між зразком та дисперсійною призмою, D_{ϕ} - кутова дисперсія призми, n_0 - постійна складова показника заломлення зразка, d - товщина зразка, α - кут падіння випромінювання на зразок.

В установці були використані лазерний діод безперервної дії з максимальним підсиленням на довжині хвилі 655 нм, дисперсійна призма з надважкого флінту $D_{\phi}=0.55$ мрад/нм. Максимальна густина потужності випромінювання в опроміненій ділянці зразка становила $3.25 \cdot 10^3$ Вт/см². Зразок являв собою плівку з луковиці жовтої цибулі товщиною $d=25$ мкм, показник заломлення $n_0 \approx 1.4 \pm 0.05$, коефіцієнт розсіяння близько 98%.



Зміна в часі показника заломлення (суцільна лінія на Рис.2) має швидкоплинну та повільну складові. Швидкоплинна складова проявляє себе безпосередньо після вмикання затвору і складає близько 0.057. Відповідна оцінка нелинійного показника заломлення $n_2 \approx 1.7 \cdot 10^{-5}$ см²/Вт.

Повільна складова показує зростання впродовж 1-2 с на 0.02-0.03, яке змінюється падінням. Причини такої поведінки на сьогодні невідомі.

Співвідношення сигнал/шум при вимірюванні $\Delta\lambda_{ЦТ}$ знаходиться в межах від 20 до 30. Це означає, що створений новий метод за ефективністю перевищує традиційні методи при дослідженні біологічних об'єктів.

Срібний В.О., Чепель Л.В., Бойко Ю.В.

ЗАСТОСУВАННЯ ЛАНЦЮГА БЛОКІВ ДЛЯ ОПРАЦЮВАННЯ ДАНИХ ІМР

Україна, м. Київ, Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
v.sribnyi.ua@gmail.com

Інтернет медичних речей (ІМР) один з провідних напрямків розвитку технологій в медицині на сьогоднішній день. До пристроїв даного напрямку відносять медичні сенсори та медичні пристрої, які відповідають за надання даних про здоров'я і проведення складних досліджень та операційних маніпуляцій пацієнта відповідно. Всі ці пристрої пов'язані між собою за рахунок використання централізованих вузлів керування та опрацювання даних, якими вони оперують [1, 5]. У загальному випадку даний вид використання ІМР супроводжується проблемами опрацювання та захисту інформації, збереження даних та утримання системи як такої [4, 6].

Для вирішення даних проблем пропонується впровадження розподіленого ланцюгу блоків (блокчейну) у вигляді математичного направлено ациклічного графа для зберігання та передачі медичної інформації, навіть на малофункціональних приладах. Сам блокчейн являє собою непорушний ланцюг інформації, яку по її внесенню вже неможливо видалити з ланцюга. Сама ж інформація міститься у блоці, базовій одиниці ланцюга, що мусить містити у собі вказівник на попередній блок, для творення непорушної структури даних, метадані підв'язані до реалізації та саму інформацію, яку ми хочемо до нього ввести. Сам же ланцюг розподіляється та знаходиться на кожному ІМР пристрої в повному чи частковому вигляді [2, 3].

На табл. 1 наведене порівняння класичної ІМР інфраструктури та інфраструктури із впровадженням блокчейну. Також на рис. 1 наведена схема роботи блокчейну на базі ІМР.

Таблиця 1

Порівняння класичної ІМР інфраструктури і інфраструктури із впровадженням блокчейну

Аспекти роботи	Класичний варіант	Блокчейн
Опрацювання даних	Використання проміжних пристроїв	Використання смарт-контрактів або валідаторів
Захист інформації	Шифрування за різними стандартами, не завжди стійке до взлому	Стійке асиметричне шифрування, захист від модифікацій
Збереження даних	Централізоване	Децентралізоване
Утримання інфраструктури	Складність в обслуговуванні та забезпеченні стабільності	Уніфікація за одним стандартом та покращена стабільність

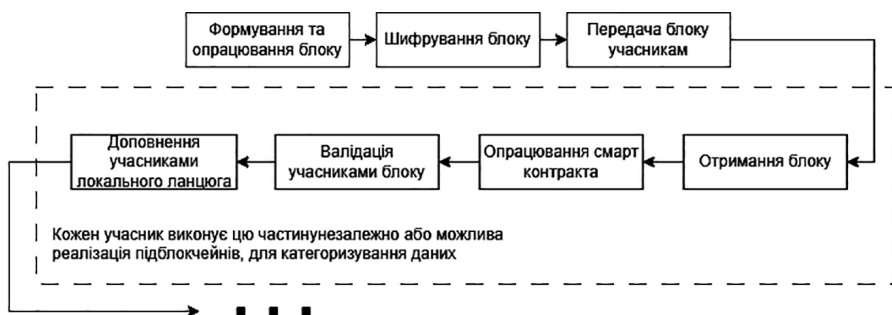


Рисунок 1. Схема блокчейну на базі ІМР інфраструктури

Отже, ІМР це перспективний напрям розвитку сучасної медицини, який, на даному етапі його впровадження, характеризується набором проблемних аспектів: безпекою передачі та збереження даних, централізацією опрацювання інформації, та убезпечення малофункціональних пристроїв. Для вирішення даних проблем пропонується впровадження блокчейну в інфраструктуру, що у подальшому навіть зможе забезпечити можливість легкого опрацювання даних, які в ньому зберігаються.

- [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 спектروفотометрії [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.

8. Технічна документація на датчик MAX30102. URL: <https://pdf1.alldatasheet.com/datasheet-pdf/view/859400/MAXIM/MAX30102.html>
9. Технічна документація на мікроконтролер ESP32. URL: https://www.espressif.com/sites/default/files/documentation/esp32_datasheet_en.pdf
10. Бібліотека SparkFun_MAX3010x_Sensor_Library. URL: https://github.com/sparkfun/SparkFun_MAX3010x_Sensor_Library
11. І.І. Бех, С.О. Мамілов, О.В. Стрикун. Програмно-алгоритмічна реалізація методів поточного контролю за змінами стану здоров'я отруєних чадним газом. // Праці ІХ Міжнародної конференції “Медична фізика – сучасний стан, проблеми, шляхи розвитку. Новітні технології”. Київ, Україна, 2020, с. 186-189.
12. I. Bekh, M. Piukha, S. Mamilov, D. Velyhotskiy, O. Strykun. Software and Hardware Implementation of Current Monitoring Methods on Changes in the Health Status of Carbon Monoxide Poisoned. // Proceedings of the “IEEE International Conference on e-Health and Bioengineering EHB 2021 - 9-th Edition”, Iasi, Romania, 2021, pp. 1-4. DOI: [10.1109/EHB52898.2021.9657688](https://doi.org/10.1109/EHB52898.2021.9657688)

Улзійжаргал Ерденцогт^{1,2}, Ю.П.Горго¹, І.О.Скороход²
**КВАНТОВІ РОЗРАХУНКИ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ПОКАЗНИКІВ
АНТИОКСИДАНТНИХ МЕХАНІЗМІВ МЕТАБОЛІТУ DDMP.**

¹КПІ ім. Ігоря Сікорського, Україна, yugorgo@ukr.net

²Інститут мікробіології та вірусології ім. Д.К.Заболотного НАН України

Відомо, що результати квантово-хімічних розрахунків, можуть бути пов'язані з антиоксидантними ефектами досліджуваних сполук в неполярному середовищі ліпідно-пептидних мембран живих клітин [1]. Для оптимізованих структур DDMP ми розраховували фізико-хімічні показники перебігу можливих антиоксидантних механізмів. Квантово-хімічний аналіз антиоксидантних і антирадикальних властивостей 2,3-дигідрокси-6-метил-(4Н)-піран-4-ону (DDMP) проводили за допомогою програмного пакету Gaussian 09W [2]. Повну оптимізацію геометрії нейтральної молекули DDMP в її основному стані проводять до мінімуму за методом теорії функціональної густини (Density Functional Theory, DFT), розрахункової моделі обмеженого (restricted,r) методу теорії функціоналу густини Беке (B3), яка використовує електронну кореляцію Лі Янга і Пара (LYP) та базисного набору 6-311++g(2d,2p): rB3LYP/6-311++g(2d,2p). Обмеження (r) визначається відсутністю неспарених електронів, які є у систем із замкнутою оболонкою [3]. Однак для оптимізації геометрії радикала та катіон-радикалу DDMP ми використали розрахункову модель необмеженого (unrestricted, u) методу теорії функціоналу густини Беке: uB3LYP/6-311++g(2d,2p), оскільки ці система з відкритими оболонками, тобто мають неспарені електрони.

Зокрема це були: - ентальпія дисоціації О-Н зв'язку (Bond Dissociation Enthalpy, BDE) розраховувалася за формулою: $BDE = H_{ArO\cdot} + H_H - H_{ArOH}$, де $H_{ArO\cdot}$ – ентальпія радикалу, який виник внаслідок дисоціації атома водню від антиоксиданта; H_H – ентальпія атома водню; H_{ArOH} – ентальпія нейтральної сполуки антиоксиданта;

- адиабатичний потенціал іонізації (Adiabatic Ionization Potential,AIP) розраховувався за формулою: $AIP = H_{ArOH^{+\cdot}} + H_e - H_{ArOH}$, де $H_{ArOH^{+\cdot}}$ – ентальпія катіон-радикалу; H_e – ентальпія електрону; H_{ArOH} – ентальпія нейтральної сполуки антиоксиданта [1];

- 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: $H_{(H)} \text{ вакуум} = -0,49764$ На [4]; $H_{(H^+)} \text{ вакуум} = 0,00236$ На [5]; $H(e^-) = 0,00119$ На [6]. Відповідно, $1 \text{ На} = 627,51$ ккал/моль $27,211$ еВ. 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 – $107,4$ 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 $82,4$ ккал/моль і перевищувала BDE гідроксильних груп в цьому положенні для Моріна, галангіна і каемферола на $5,36$; $6,25$ і $6,09$ 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.

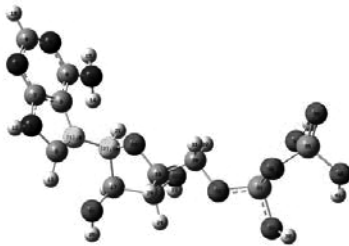


Fig. 1 ATP molecule model
I II

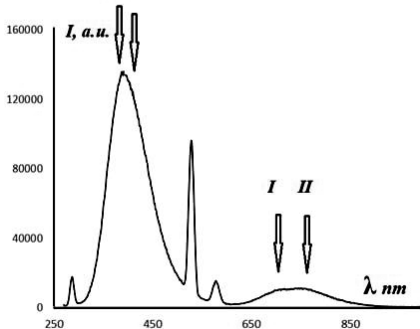


Fig. 2 Demonstrates two harmonics (I, II)

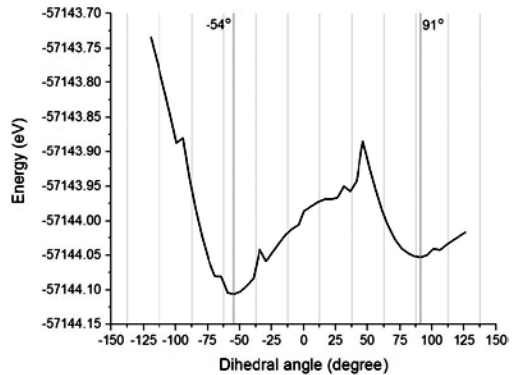


Fig.3 The conformer profile for ATP molecule in water

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

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