

## Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-16-0600****Štruktúra a reaktivita aptamérov a vybraných molekulových systémov v patologickej forme priónov**Zodpovedný riešiteľ **prof. Ing. Pavel Mach, CSc.**Príjemca **Univerzita Komenského v Bratislave - Fakulta matematiky, fyziky a informatiky**

### Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Katedra Jadrovej fyziky a biofyziky, Fakulta matematiky, fyziky a informatiky, Univerzita Komenského v Bratislave

### Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

nie je

### Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

nie sú

### Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

Blažko, M. Mach, P. Antušek, A. Urban, M., DFT Modeling of Cross-Linked Polyethylene: Role of Gold Atoms and Dispersion Interactions, J. Phys. Chem. A, 122, 1496 – 1503, (2018), doi: 10.1021/acs.jpca.7b12232,

Babincová, M., Durdík, Š., Babincová, N., Sourivong, P., Babinec, P. Application of cationized magnetoferritin for magnetic field-assisted delivery of short interfering RNA in vitro (2018) Lasers in Medical Science, 33 (8), pp. 1807-1812. DOI: 10.1007/s10103-018-2547-0

Babincová, M., Vrbovská, H., Sourivong, P., Babinec, P., Durdík, Š. Application of albumin-embedded magnetic nanoheaters for release of etoposide in integrated chemotherapy and hyperthermia of U87-MG glioma cells (2018) Anticancer Research, 38 (5), pp. 2683-2690. DOI: 10.21873/anticancer.12510

B. Michalczuk, L. Moravský, P. Papp, P. Mach, M. Sabo and Š. Matejcík, Isomer and conformer selective atmospheric pressure chemical ionisation of dimethyl phthalate, Phys.Chem.Chem.Phys., (2019), 21, 13679.

Melánia Babincová, Peter Babinec: Photovoltaic Generator Based on Laser-Induced Reversible Aggregation of Magnetic Nanoparticles, Zeitschrift für Naturforschung A, (2019) <https://doi.org/10.1515/zna-2019-0247>

Babincová, N., Jirsák, O., Babincová, M., Babinec, P., Šimaljaková, M. Remote magnetically controlled drug release from electrospun composite nanofibers: design of a smart platform for therapy of psoriasis (2020) Zeitschrift für Naturforschung - Section A

Journal of Physical Sciences, 75 (7), pp. 587-591. DOI: 10.1515zna-2020-0087 ISSN: 09320784

Babincová, M., Babinec, P. Photovoltaic generator based on laser-induced reversible aggregation of magnetic nanoparticles, (2020) Zeitschrift fur Naturforschung - Section A Journal of Physical Sciences, 75 (2), pp. 171-173. DOI: 10.1515zna-2019-0247 ISSN: 09320784

Krafcik, A., Babinec, P., Babincova, M., Frollo, I. Importance of basset history force for the description of magnetically driven motion of magnetic particles in air (2020) Measurement Science Review, 20 (2), pp. 50-58. DOI: 10.2478/msr-2020-0007 ISSN:13358871

Saurabh Kumar Pandey, Milan Melicherčík, David Řeha, Rüdiger H. Ettrich and Jannette Carey, Conserved Dynamic Mechanism of Allosteric Response to L-arg in Divergent Bacterial Arginine Repressors, Molecules 2020, 25, 2247; doi10.3390/molecules25092247

Andrýsková, N. Sourivong, P. Babincová, M. Šimaljaková, M., Controlled release of tazarotene from magnetically responsive nanofiber patch towards more efficient topical therapy of psoriasis, Applied sciences, Vol. 11, No 22 (2021), pp [1-9] Online <https://www.mdpi.com/2076-3417/11/22/11022/htm> ISSN (online) 2076-3417

Vrbovská, H., Babincová, M., Babinec, P.: Properties of magnetic nanoparticles and their role in therapy of neurodegenerative diseases (2018) NANOCON 2017 - Conference Proceedings, 9th International Conference on Nanomaterials - Research and Application, 2017-October, pp. 479-484. ISBN: 978-808729481-9. © 2018 TANGER Ltd

### **Uplatnenie výsledkov projektu**

Nové, fyzikálne orientované pohľady na mechanizmy vzniku a rozvoja priónových ochorení môžu pomôcť k pochopeniu a nasmerovaniu nových metód terapie týchto ochorení.

### **Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)**

Priónmi spôsobené transmisívne spongiformné encefalopatie sú smrteľné a neliečiteľné, napriek nesmiernemu úsiliu vedcov najrozličnejších špecializácii. My sme sa snažili prispieť k pochopeniu etiopatogenézy a terapii tejto choroby z neštandardného pohľadu fyzika. Pomocou fluorescenčnej a polarizačnej mikroskopie sme ukázali, že funkcionálne magnetické nanočastice môžu efektívne deštruovať už utvorené amyloidné plaky, môžu preventívne zabraňovať ich tvorbe a môžu byť tiež použité na ich diagnostiku. Navrhli a rozpracovali sme aj detailný mechanizmus tohto procesu.

Použitím metód molekulovej dynamiky s rôznymi typmi silových polí, ako aj Ab initio molekulovej dynamiky bolo študované viazanie katiónov  $\text{Cu}^{2+}$  na proteín v neusporiadanej oblasti, kde nie sú k dispozícii experimentálne štruktúry; a taktiež štruktúrne a dynamické vlastnosti prion viažúceho aptaméru, kde sa študovala najmä dynamika a energetika výmeny  $\text{K}^+$  iónov medzi dutinou G-kvadruplexu a vonkajším prostredím. Zaujímavé sú aj metodické poznatky o vhodnosti jednotlivých metód na takéto špecifické prípady.

Veríme, že sme týmito fyzikálnymi prístupmi, publikovanými v desiatich prácach, inšpirovali aj ďalších vedcov, o čom svedčí už 30 citácií nami dosiahnutých výsledkov.

### **Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)**

Prion-induced transmissible spongiform encephalopathies are deadly and incurable, despite the tremendous efforts of scientists of all specializations. We have tried to contribute to the understanding of the etiopathogenesis and therapy of this disease from a non-standard physicist's point of view. Using fluorescence and polarization microscopy, we have shown that functional magnetic nanoparticles can effectively destroy already formed amyloid plaques. We have also designed and developed a detailed mechanism for this process.

Using methods of molecular dynamics with different types of force fields as well as Ab initio molecular dynamics, the binding of  $\text{Cu}^{2+}$  cations to a protein in a disordered region where exact experimental structures are not available has been studied; as well as the structural and dynamic properties of the prion-binding aptamer, where the dynamics and energetics of  $\text{K}^+$  ion exchange between the cavity of the G-quadruplex and the external medium (solvent) were studied. Accumulated methodological understanding of the suitability of individual methods for these specific cases is also interesting.:

We believe that we have inspired other scientists with these physical approaches, published

in ten works, as evidenced already by 30 citations to our results.