# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0825U000920

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 18-03-2025

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Бубон Тетяна Леонідівна
2. Tetiana L. Bubon

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0001-7049-9386

**Вид дисертації:** доктор філософії

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 104

**Назва наукової спеціальності:** Фізика та астрономія

**Галузь / галузі знань:** природничі науки

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** 104 Фізика та астрономія

**Дата захисту:** 24-04-2025

**Спеціальність за освітою:** Фізика та астрономія

**Місце роботи здобувача:** Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417124

**Місцезнаходження:** вул. Метрологічна, буд. 14-б, Київ, 03143, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** PhD 7837

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417124

**Місцезнаходження:** вул. Метрологічна, буд. 14-б, Київ, 03143, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

## IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417124

**Місцезнаходження:** вул. Метрологічна, буд. 14-б, Київ, 03143, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 29.29.43, 29.29.45

### Тема дисертації:

1. Моделювання коливальної динаміки іон-гідратної оболонки подвійної спіралі ДНК

2. Modeling vibrational dynamics of the ion-hydration shell of DNA double helix

### Реферат:

1. В умовах живої клітини молекула ДНК приймає форму подвійної спіралі, що складається з двох ланцюгів нуклеотидів, закручених один навколо одного. Гідрофобні нуклеїнові основи нуклеотидів утворюють комплементарні пари, зв'язані водневими зв'язками всередині макромолекули, уникаючи контакту з молекулами води. Аденін (A) зв'язується з тиміном (T), а гуанін (G) з цитозином (C). Негативно заряджені фосфатні групи остова подвійної спіралі знаходяться ззовні подвійної спіралі та обернені до розчину. Фосфатні групи ДНК нейтралізуються позитивно зарядженими іонами металів (Na□, K□, $Mg^2$□) або молекулярними іонами (поліаміни). Нейтралізуючі іони називають протийонами. Починаючи з перших

досліджень структури молекули ДНК було показано, що іон-гідратне середовище стабілізує структуру макромолекули. Динаміка подвійної спіралі ДНК та її іон-гідратного оточення взаємопов'язані, що є також визначальним для механізмів білково-нуклеїнового розпізнавання та взаємодії ДНК з біологічно активними сполуками. Визначальна роль іон-гідратної оболонки ДНК робить її дослідження ключовим для розуміння фізичних механізмів функціонування самої макромолекули. На сьогодні вивчення властивостей іон-гідратної оболонки ДНК є актуальною проблемою, про що свідчить низка робіт, в яких досліджуються структурні та динамічні властивості іонів та молекул води навколо подвійної спіралі. Одним із важливих питань для опису динамічної характеристики системи ДНК-вода-іони є дослідження саме коливальної динаміки молекул води та протийонів біля сайтів зв'язування з атомними групами ДНК, що може займати визначальне місце для біологічних процесів в системі. Наявні експериментальні методи можуть надати коливальні спектри, в яких проявляються моди коливань структурних елементів систем ДНК-вода-іони, аналіз та вивчення яких є важливим для характеристики їх структури та динаміки. Однак все ще доволі складно виділити й описати характер мод коливань молекул води та протийонів іон-гідратної оболонки ДНК, що безпосередньо взаємодіють з подвійною спіраллю та лежать у низькочастотному діапазоні спектра (< 400 см$^{-1}$). У дисертаційній роботі була досліджена коливальна динаміка іон-гідратної оболонки ДНК, використовуючи теоретичний підхід та комп'ютерні симуляції. Був проведений аналіз для вивчення коливальної динаміки молекул води та протийонів лужних металів іон-гідратної оболонки ДНК. Визначено вплив окремих протийонів на динаміку молекул води гідратної оболонки подвійної спіралі. Виявлено вплив характеру гідратації протийонів і структурної організації молекул води в різних областях подвійної спіралі.

2. In a living cell, DNA adopts the form of a double helix, consisting of two chains of nucleotides winding around each other. The hydrophobic nucleotide bases form complementary hydrogen-bonded pairs inside the macromolecule, reducing contact with water molecules. Adenine (A) is hydrogen-bonded to thymine (T), and guanine (G) is hydrogen-bonded to cytosine (C). The negatively charged phosphate groups of the double helix backbone are located on the outside of the helix, facing the solution. The phosphate groups of DNA are neutralized by positively charged metal ions ($Na^+$, $K^+$, $Mg^{2+}$) or molecular ions (polyamines). These ions are referred to as counterions. In the early studies of DNA structure, it was shown that the ion-hydration environment stabilizes the macromolecule's structure. The dynamics of the DNA double helix and its ion-hydration shell are interrelated, crucial for protein-nucleic recognition and DNA interaction with biologically active compounds. The critical role of the ion-hydration shell of DNA makes its study key to understanding the physical mechanisms underlying the macromolecule's function. The features of the ion-hydration shell are still actively studied from the point of view of the structural and dynamical properties of ions and water molecules around the double helix. An important aspect of characterizing the dynamic properties of the DNA-water-ion system is the investigation of the vibrational dynamics of water molecules and counterions near the DNA surface, which may play a decisive role in biological processes. Using various experimental methods, it is possible to extract vibrational spectra and thus sample the vibrational modes of the structural elements of DNA-water-ion systems. However, it is still quite challenging to distinguish and characterize in detail the intermolecular vibrational modes of water molecules and counterions in the ion-hydration shell of DNA, which directly interact with the double helix and are observed in the low-frequency range of the spectrum (< 400 cm$^{-1}$). In the thesis, the vibrational dynamics of the DNA ion-hydration shell were investigated using a theoretical approach and computer simulations. An analysis was conducted to study the vibrational dynamics of water molecules and alkali metal counterions in the DNA ion-hydration shell. The influence of individual counterions on the dynamics of water molecules of the DNA ion-hydration shell was identified. The impact of the character of hydration of counterions and the structural organization of water molecules in different regions of the double helix was elucidated.

**Державний реєстраційний номер ДіР:** 0120U100855, 0121U111838

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку

суспільства і держави

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Не застосовується

**Підсумки дослідження:** Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

**Публікації:**

- T.L. Bubon, S.M. Perepelytsya. Low-frequency vibrations of water molecules in DNA minor groove. European Physical Journal E. 44(6), 84 (2021).
- Tetiana Bubon, Oleksii Zdorevskyi, Sergiy Perepelytsya. Molecular dynamics study of collective water vibrations in a DNA hydration shell. European Biophysics Journal. 52(1-2), 69-79 (2023).
- Tetiana Bubon, Khatereh Azizi. Effects of alkali-metal counterions on the vibrational dynamics of the DNA hydration shell. The Journal of Physical Chemistry B. 129(1), 28–40 (2025).

**Наукова (науково-технічна) продукція:** методи, теорії, гіпотези

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:** Планується до впровадження

**Зв'язок з науковими темами:** 0120U100855

## VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Перепелиця Сергій Миколайович

2. Sergiy M. Perepelytsya

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., с.д., 01.04.02, 03.00.02

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0002-9064-4234

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417124

**Місцезнаходження:** вул. Метрологічна, буд. 14-б, Київ, 03143, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Ніколаєнко Тимофій Юрійович

2. Tymofii Y. Nikolaienko

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.14, 03.00.02

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0002-0146-8903

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, буд. 60, Київ, 01033, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Сектор науки:** Університетський

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Шестопалова Ганна Вікторівна

2. Ganna V. Shestopalova

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., професор, 03.00.02

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0001-7613-7212

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут радіофізики та електроніки ім. О. Я. Усикова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03534593

**Місцезнаходження:** вул. Академіка Проскури, буд. 12, Харків, Харківський р-н., 61085, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

**Рецензенти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Брижик Лариса Свиридівна

2. Larissa S. Brizhik

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.02

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0002-5668-7740

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417124

**Місцезнаходження:** вул. Метрологічна, буд. 14-б, Київ, 03143, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Капітанчук Олексій Леонідович
2. Oleksiy L. Kapitanchuk

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., с.д., 01.04.02

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0002-2789-3676

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417124

**Місцезнаходження:** вул. Метрологічна, буд. 14-б, Київ, 03143, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

## VIII. Заключні відомості

| | |
|---|---|
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради** | Лев Богдан Іванович |
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні** | Лев Богдан Іванович |
| **Відповідальний за підготовку облікових документів** | Бубон Тетяна Леонідівна |
| **Реєстратор** | УкрІНТЕІ |

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

Юрченко Тетяна Анатоліївна