

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0599U000542

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-06-2000

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Говорун Дмитро Миколайович

2. Govorun Dmytro Mykolajovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 03.00.03

Назва наукової спеціальності: Молекулярна біологія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 23-11-1999

Спеціальність за освітою: 7.070201

Місце роботи здобувача: Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417105

Місцезнаходження: 03143 м.Київ, вул.Заболотного, 150

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д26.237.01

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

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

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417105

**Місцезнаходження:** 03143 м.Київ, вул.Заболотного, 150

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 34.15.17

**Тема дисертації:**

1. Фізико-хімічні механізми біомолекулярного впізнавання
2. Physico-chemical mechanisms of biomolecular recognition

**Реферат:**

1. Встановлено найбільш загальні фізико-хімічні механізми білково- нуклеенового і нуклееново- нуклеенового впізнавання. Розширено уявлення про структурно-динамічні і енергетичні властивості нуклеотидних основ та їхній стекінг. Встановлено, що основи НК, як і самі НК, унікально поїднують у собі цілу низку взаємопов'язаних форм структурно- мінливості - прототропну таутомерію, структурну нежорсткість, геометричну ізомерію, здатність приїднувати або відщеплювати протон, спонтанно дезамінуватися і окислюватися тощо. Розроблено моделі спонтанних напіврозкритих станів ДНК та її передплавлення, далекодіє в ДНК та її просторовое викривленості, генотоксичного впливу на неї УФ- опромінення, кооперативності; встановлено основні мікроструктурні чинники структурно-динамічного гетерогенності ДНК. Представлено низькочастотні Раманівські спектри компонентів НК, що послідовно ускладнюються, та співкристалізацій типу "основа - похідна амінокислоти". Підтверджено класичну модель Маліїва низькочастотного рухомості ДНК. Досліджено енергетику і кооперативні властивості Н-зв'язків у кристалах і співкристалізатах основ ДНК.

2. The dissertation is devoted to the study of the most general physico-chemical mechanisms of a protein- nucleic acid and nucleic acid-nucleic acid recognition. It was established that the NA bases with aminogroup are molecules with non-rigid structure, dipole-active interconversion of which occurs via three energetically and topologically non-equivalent ways - the "over-barrier" large amplitude inverse vibration of amino fragment and two essentially anisotropic "under-barrier" rotations of aminogroup. It was shown, that stacking of the NA bases and their Watson-Crick pairs does not boil down to non-specific interactions of static planar-parallel structures: contribution of specific Coulomb contacts of amino nitrogen atoms' lone-pairs with hydrogen atoms of adjacent (upper or lower) bases - so called vertical H-bonds - are substantial. Implying molecular regulation it was suggested to consider the NA bases' aminogroup as "a molecular joint", non-linear mobility of which could be controlled by H-bonds both directly and at a distance. The Watson-Crick base pairs were established to be extremely soft as to "propeller-twist" and "sharp bend" angles and capable of adoption non-planar conformation under influence of small external perturbations, as it takes place in DNA. There are developed microstructural models of spontaneous semiopen states of DNA and its premelting, long-range action in DNA and its spatial curvature, genotoxic effects of UV irradiation. Microstructural sources of a DNA structural-dynamic heterogeneity which dominates in protein-nucleic acid recognition were considered. The conclusion was made that leading stereochemical principle of DNA spatial structure is not isomorphism of Watson-Crick pairs but their structural-dynamical conformity. It was shown that the NA bases like NA themselves accumulate uniquely whole gamma of mutually conjugated forms of structural changeability - prototropic tautomerism, structural non-rigidity, geometric isomerism, capability to accept or to give a proton, the ir spontaneous deamination or oxidation under the contact with water and so on. It was demonstrated that prototropic tautomerism is far not confined to point mutagenesis. Biological significance of high energy tautomers, inaccessible to direct physico-chemical detection, so called "latent structures", is discussed. It is noted, that their biological importance is not directly connected with their energetic stability. A complete multitude of point H-contacts of the "a nucleotide base - an amino acid residue" type, stabilised by two H-bonds, were investigated. It was shown, that already at this level the recognition occurs according to scenario of mutual structural-dynamical adaptivity with participation of essentially interdependent intra- and intermolecular H-bonds capable not only of forming and breaking but also of switching over in a way of bifurcations. A structural non-rigidity of the bases is believed to be a security of unerring and expeditious recognition in conditions of the free volume deficit which is characteristic part for a living cell. The low-frequency Raman spectra of successively complicated NA components, as well as cocrystallizates of the "a base - an amino acid derivative" type are presented. Dynamic and energetic features of torsional tunnel junction of methyl group of Thy and the bases substituted at glycosidic nitrogen atoms are determined. An adequacy of the classical Maleev's model is confirmed: low-frequency qualitative mode observed in DNA Raman spectra is interpreted as collective extensional optical oscillations, exactly - librations of paired bases around glycosidic bond, which effectively interact with both acoustic extensional phonons and collective inverse vibrations of amino groups, are accompanied by collective torsional tunnel junction of the Thy methyl groups. A biological applications of this mode are discussed. An energetics and cooperative properties of H-bonds in crystals and cocrystals of nucleotide bases - model of nucleic acid-nucleic acid recognition - are investigated .

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:**

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Підсумки дослідження:**

**Публікації:**

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Мацука Геннадій Харлампійович

2. Мацука Геннадій Харлампійович

**Кваліфікація:** д.б.н., 03.00.03

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Їльська Ганна Валентинівна

2. Їльська Ганна Валентинівна

**Кваліфікація:** д.б.н., 0.00.03

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Зима Валентин Леонідович

2. Зима Валентин Леонідович

**Кваліфікація:** д.б.н., 03.00.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Харкянен Валерій Миколайович

2. Харкянен Валерій Миколайович

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 03.00.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Рецензенти**

**VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Мацука Геннадій Харлампійович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Мацука Геннадій Харлампійович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.