Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U005767

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2009

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Суханов Олег Станіславович
2. Sukhanov Oleg Stanislavovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 12-12-2008

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я.Усикова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534593

Місцезнаходження: 61085, м. Харків, вул. Ак.Проскури,12

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 64.051.14

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Державна наукова установа "Науково-технологічний комплекс "Інститут монокристалів" Національної академії наук України"

Код за ЄДРПОУ: 23759880

Місцезнаходження: 61001, Харків, пр. Леніна, 60

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15.15

Тема дисертації:

1. Теоретичне дослідження структури та властивостей моно- і полігідратів гуаніну та аденіну
2. Theoretical research the structure and property of mono- and polyhydrates of guanine and adenine

Реферат/анотація:

1. Об’єкти дослідження: моно- та полігідратовані комплекси гуаніну та аденіну. Мета: теоретичне дослідження впливу гідратної оболонки на геометричні параметри і властивості аденіну і гуаніну, характеру можливих міжмолекулярних взаємодій між водою і основами, а також впливу води на відносну стабільність рідкісних і канонічних таутомерів пуринових основ. Методи: розрахункові методи неемпіричної квантової хімії і молекулярної динаміки з урахуванням електронної кореляції в рамках теорії функціоналу густини і теорії збурень Меллера-Плессета другого порядку. Наукова новизна: було досліджено всі найбільш стабільні моногідрати таутомерів гуаніну і аденіну, вивчено особливості міжмолекулярних взаємодій в полігідратах аденіну і гуаніну, які включають 12-17 молекул води, вперше в наближенні Карр-Паррінелло вивчено структуру аденіну і гуаніну у водному середовищі. Практичне значення: уточнення параметризації силових полів молекулярної динаміки, за допомогою яких описується динаміка нуклеїнових кислот, інтерпретація спектральних даних про таутомерні рівноваги.

2. Objects of investigation: mono- and polyhydrates complexes of adenine and guanine The aim: theoretical investigation the influence of water shell in geometry and property of adenine and guanine, the character of possible intermolecular interactions between water and nucleic bases and contribution water molecules to relative stability rare and canonic purine bases. The methods: non-empirical quantum chemistry and molecular dynamics methods including electron correlation at frameworks of density functional theory and the second order perturbation Moller Plesset theory. Scientific novelty: the systematic research of the structure of the most stable guanine and adenine tautomers monohydrates was performed in the context of this thesis. The specific character of intermolecular interaction was investigated for polyhydrated complexes of guanine and adenine which include 12-17 water molecules The structure adenine and guanine in water environment has been found by Car-Parrinello aproach. Application: the more precise force fields parameterization for DNA molecular dynamics and interpretation spectral data for DNA bases tautomeric transition.

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. Шишкін Олег Валерійович
2. Shishkin Oleg Valerievich

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03

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. Лобанов Віктор Васильович

2. Лобанов Віктор Васильович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Калугін Олег Миколайович

2. Калугін Олег Миколайович

Кваліфікація: к.х.н., 02.00.04

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 Орлов Валерій Дмитрович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Орлов Валерій Дмитрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.