Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0413U001063

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-01-2013

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Паламарчук Геннадій Вікторович
2. Palamarchuk Gennadiy Viktorovych

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: 14-12-2012

Спеціальність за освітою: 8.07.03.03

Місце роботи здобувача: 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

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: 31.23.29.09

Тема дисертації:

1. "Конформаційні характеристики та внутрішньомолекулярні водневі зв'язки в аніонах 2'-дезоксирибонуклеотидів та їх протонованих таутомерах"

2. "Conformational characteristics and intramolecular hydrogen bonds in 2'-deoxyribonucleotides and their protonated tautomers"

Реферат:

1. Об'єкт дослідження: протонування моноаніонів 2'-дезоксирибонуклеотидів по гетероатомах азотистої основи та його вплив на конформаційні характеристики нуклеотидів, а також параметри внутрішньомолекулярних водневих зв'язків. Мета дослідження: визначення конформаційних характеристик і внутрішньомолекулярних взаємодій в моноаніонах класичних 2'-дезоксирибонуклеотидів та їх протонованих за азотистою основою таутомерах. Особлива увага приділялася впливу внутрішньомолекулярних взаємодій водневих зв'язків на конформацію і енергетику молекул. Методи дослідження та апаратура: дослідження виконані за допомогою теоретичних методів неемпіричний квантової хімії з урахуванням електронної кореляції в рамках теорії функціоналу електронної густини (функціонал B3LYP з базисами 6-311++G(d,p) та AUG-cc-pVDZ) і теорії збурення Мюллера-Плессета другого

порядку (MP2/6-311G(d,p)). Внутрішньомолекулярні взаємодії вивчені за допомогою топологічного аналізу розподілу електронної густини в рамках теорії Бейдера "Атоми в молекулах" і методу натуральних орбіталей зв'язків (NBO). Дослідження динаміки молекули AMP здійснювали методом неемпіричної молекулярної динаміки Кара-Парінелло. Теоретичні та практичні результати: проведено систематичне дослідження конформаційних характеристик аніонів канонічних 2'-дезоксирибонуклеотидів; встановлено наявність ряду внутрішньомолекулярних водневих зв'язків, що впливають на конформацію нуклеотидів; проаналізовано зміни в енергетиці і характері внутрішньомолекулярних взаємодій в аніонах класичних 2'-дезоксирибонуклеотидів при включенні їх у структуру різних типів ДНК; вивчено вплив протонування азотистої основи на структуру, енергетику та внутрішньомолекулярні взаємодії в аніонах 2'-дезоксирибонуклеотидів; встановлено спорідненість до протону кожного гетеро атома азотистої основи та розраховано заселеність таутомерів протонованих нуклеотидів; на прикладі молекули AMP показано взаємозв'язок між конформаційною динамікою нуклеотидів та таутомерними переходами. Новизна: отримані дані представляють основу для уточнення параметризації силових полів класичної молекулярної динаміки, які використовуються для моделювання структури та динаміки ДНК. Упровадження: немає. Сфера (галузь) використання: вдосконалення методів класичної молекулярної динаміки, уточнення параметризації силових полів класичної молекулярної динаміки, моделювання структури та динаміки ДНК методами класичної молекулярної динаміки.

2. The object of the research is: protonation of heteroatoms of nucleobases of anions of the canonical 2'-deoxyribonucleotides and their influence to the conformational characteristics of nucleotides and parameters of intramolecular hydrogen bonds. The purpose of the research is: definition of the conformational characteristics and intramolecular hydrogen bonds in monoanions of canonical 2'-deoxyribonucleotides and their protonated by heteroatoms of nucleobases tautomers. Special attention was handling to the influence of the intramolecular hydrogen bonds to the conformation and relative energy of molecule. The methods employed are: theoretical methods of non-empiric quantum chemistry using the density functional theory with the Becke's three-parameter exchange functional and the gradient-corrected functional of Lee, Yang and Parr (6-311++G(d,p) and aug-cc-pvdz basis sets were applied) and at the MP2/6-311G(d,p) level of theory. Intramolecular interactions was carried out within Bader's AIM approach using the B3LYP/6-31++G(d,p) wave function and Natural Bonding Orbitals Theory (NBO). The molecular dynamics simulations of AMP molecule were carried out using Car-Parrinello molecular dynamics (CPMD) simulations. The theoretical and practical value of the research: systematical investigation of conformational and energetical characteristics of anions of the canonical 2'-deoxyribonucleotides was performed; set of intramolecular hydrogen bonds that influence to the geometry of nucleotides was shown; changes in energetical characteristics of molecules and in characters of intramolecular interactions in anions of canonical 2'-deoxyribonucleotides during their incorporation to the structure of DNA was analyzed; influence of protonation of heteroatoms of nucleobases to the structure, energetical characteristics and intramolecular interactions in anions of the canonical 2'-deoxyribonucleotides was studied; value of proton affinity for each of the heteroatoms of nucleobases and the distribution of protonated tautomers was defined; for the AMP molecule mutual influence of conformational dynamics of nucleotides and their tautomerical transition was described. The novelty: obtained data are the base for the parameterization of force fields of classical molecular dynamics, that used for modeling of structure and dynamics of DNA. Information about characters of changes of conformational characteristics of the nucleotides during the protonation is useful for understanding of molecular mechanisms of damages of nucleic acids structure due to the action of acid agents. Implantation: none. Region of application: parametrization of force fields of classic molecular dinamics, modeling of structure and dinamics of the DNA by the methods of classic molecular dynamics.

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. Shyshkin Oleg Valeriyovych

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. Дорошенко Андрій Олегович

2. Дорошенко Андрій Олегович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.03, 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. Шестопалова Ганна Вікторівна

2. Шестопалова Ганна Вікторівна

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 Орлов Валерій Димитрович

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

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.