

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0523U100121

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-07-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Перепелиця Сергій Миколайович

2. Perepelytsya Sergiy Mykolayovych

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Шифр наукової спеціальності: 03.00.02

Назва наукової спеціальності: Біофізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 20-06-2023

Спеціальність за освітою: фізика

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

Код за ЄДРПОУ: 05417124

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

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 26.001.08

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

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 60, м. Київ, 01033, 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:** Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417124

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

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.29, 34.17

**Тема дисертації:**

1. Структура та динаміка впорядкування протийонів навколо подвійної спіралі ДНК
2. Structure and dynamics of counterion ordering around the DNA double helix

**Реферат:**

1. В дисертації сформульовано концепцію динамічної іон-фосфатної ґратки ДНК, згідно з якою протийони навколо подвійної спіралі утворюють впорядко-вану структуру, подібну до ґратки іонного типу. Для визначення проявів впоряд-кування протийонів в коливальних спектрах розвинуто моделі динаміки іон-фосфатної ґратки ДНК та побудовано підхід для описання інтенсивностей мод в низькочастотних спектрах комбінаційного розсіювання світла. В результаті вияв-лено моди іон-фосфатних коливань для різних форм подвійної спіралі ДНК у ви-падку протийонів Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Rb<sup>+</sup>, Cs<sup>+</sup> і Mg<sup>2+</sup> в діапазоні частот від 100 до 180 см<sup>-1</sup>. Пояснено прояви впорядкування протийонів ДНК в експериментах з електропро-відності водних розчинів ДНК та в експериментах з дослідження текстур висуше-них плівок ДНК з солями лужних металів. В рамках методу молекулярної дина-міки показано, що впорядкування протийонів навколо ДНК суттєво залежить від характеру їх гідратації, а рух протийонів під дією зовнішнього електричного по-ля модулюється

послідовністю пар основ. Вперше визначено структуру характерних комплексів в сольватній оболонці фосфатних груп остова подвійної спіралі ДНК за присутності молекул пероксиду водню та протийонів Na<sup>+</sup>. Дослідження впорядкування молекулярних протийонів (молекул поліамінів путресцину<sup>2+</sup>, спермідину<sup>3+</sup>, сперміну<sup>4+</sup>) показало, що вони переважно локалізуються в мінорному жолобі подвійної спіралі з найменшою шириною, що обумовлює їхню специфічність до послідовності пар нуклеотидів типу А-тракту. В областях, де відбуваються ДНК-ДНК контакти, поліаміни впорядковуються, утворюючи міжспіральні зшивки.

2. The concept of the dynamical DNA ion-phosphate lattice has been formulated in the thesis, according to which the counterions around the double helix form a regular structure similar to an ionic lattice. To determine the manifestations of counterion ordering in vibrational spectra, models of the dynamics of the ion-phosphate lattice of DNA were developed and an approach was built to describe the intensities of modes in low-frequency Raman spectra. As the result, the modes of ion-phosphate vibrations in the range from 100 to 180 cm<sup>-1</sup> have been determined for Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Rb<sup>+</sup> and Cs<sup>+</sup> counterions. Manifestations of the arrangement of DNA counterions in experiments on the electrical conductivity of aqueous solutions of DNA and in experiments on the study of the textures of dried DNA films with alkali metal salts are explained. Within the framework of the molecular dynamics method, it is shown that the distribution of counterions with respect to the DNA essentially depends on the character of hydration, and the movement of counterions under the action of an external electric field is modulated by the sequence of base pairs. For the first time, the structure of characteristic complexes in the solvate shell of phosphate groups of the backbone of the DNA double helix was determined in the presence of hydrogen peroxide molecules and Na<sup>+</sup> counterions. The study of ordering of molecular counterions (molecules of polyamines putrescine<sup>2+</sup>, spermidine<sup>3+</sup>, spermine<sup>4+</sup>) showed that they are mainly localized in the minor groove of the double helix with the smallest width, which determines their preferential binding to the A-tract nucleotide motif. In the regions where DNA-DNA contacts occur, polyamines are arranged, forming interhelical crosslinks.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Перепелиця Сергій Миколайович

2. Perepelytsya Sergiy Mykolayovych

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.14

**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. Перепелиця Сергій Миколайович

2. Perepelytsya Sergiy Mykolayovych

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.14

**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. Головка Мирослав Федорович

2. Holovko Myroslav Fedorovych

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

**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. Шестопалова Ганна Вікторівна
2. Shestopalova Ganna Victorivna

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 03.00.02, 104

**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. Чалий Олександр Васильович
2. Chaly Aleksandr Vasiliyevich

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

Булавін Леонід Анатолійович

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

Булавін Леонід Анатолійович

