Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0507U000408

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-07-2007

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шестопалова Ганна Вікторівна
2. Shestopalova Ganna Victorivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 03.00.02

Назва наукової спеціальності: Біофізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 08-06-2007

Спеціальність за освітою: 7.070204

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 64.051.13

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: 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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 34.17.15

Тема дисертації:

1. Молекулярні механізми гідратації та комплексоутворення нуклеїнових кислот з біологічно активними речовинами

2. Molecular mechanisms of hydration and complex formation of nucleic acids with biological active compounds

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження: структура та гідратне оточення фрагментів нуклеїнових кислот (НК) різного нуклеотидного складу, ароматичних біологічно активних речовин (БАР) та комплексів фрагментів НК з БАР. Мета роботи: з'ясувати основні закономірності формування структури і гідратного оточення НК різного нуклеотидного складу та конформацій, ароматичних БАР та їх комплексів з НК. Методи дослідження: метод Монте Карло, молекулярної динаміки і молекулярного докінгу; ІЧ- спектроскопія, п'єзогравіметрія. В дисертаційній роботі вперше отримано та візуалізовано просторові структури, гідратні оболонки, обчислено різні складові енергій взаємодії для систем, що містять фрагменти НК різного складу та конформацій, БАС та комплекси фрагментів НК з дослідженими БАС. Встановлено молекулярні механізми формування гідратних оболонок олігонуклеотидів в залежності від їх складу та конформації; запропоновано найбільш ймовірні моделі комплексів фрагментів НК та досліджених БАР і встановлено роль водного оточення у стабілізації

такихкомплексів. Сумісний аналіз результатів комп'ютерного моделювання та експериментальних даних, запропонований у роботі, може бути застосовано як метод отримання та оцінки фізичних параметрів прояву біологічної активності потенційних протипухлинних препаратів на молекулярному рівні. Сфера застосування - молекулярна біофізика, біотехнологія, молекулярна біологія та фармакологія.

2. Objects of investigation are the structure and hydration environment of nucleic acids (NA) fragments with different nucleotides compositions and conformations, aromatic biological active compounds (BAC) and NA-BAC complexes. The aim of this work is to get understanding of underlying principles of the formation of structure and hydration NA fragments, BAC and the complexes of NA-BAC. Methods of investigation: a Monte Carlo method, molecular dynamics, molecular docking; IR-spectroscopy, piezogravimetry. In the dissertation work a solution of important problem of molecular biophysics was given for the first time: the structures and hydration environments are found and visualized; the different components of interaction energies are calculated for all systems under investigation. The molecular mechanisms of formation of hydration environments of oligonucleotides on dependence of their composition and conformation are established; the most probable molecular models of NA-BAC investigated complexes are suggested; the role of water environment in stabilization of such complexes is determined. The combined analisys of the results of computer simulations and experimental data may be proposed as the method for getting and estimation of physical parameters of biological activity of potential anticancer drugs on molecular level. Field of application - molecular biophysics, biotechnology, molecular biology and pharmacology

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)

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Говорун Дмитро Миколайович

2. Говорун Дмитро Миколайович

Кваліфікація: д.б.н., 03.00.02, 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сорокін Віктор Олександрович

2. Сорокін Віктор Олександрович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 03.00.02, 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Волков Сергій Наумович

2. Волков Сергій Наумович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02, 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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Товстяк Володимир Васильович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Товстяк Володимир Васильович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.