

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U002409

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-06-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Микуляк Василь Васильович

2. Mykulyak Vasiliy Vasilievich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 03.00.02

Назва наукової спеціальності: Біофізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 01-06-2016

Спеціальність за освітою: 8.040102004

Місце роботи здобувача: Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417101

Місцезнаходження: 03680 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):** Д 26.001.38

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

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 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:** Київський національний університет імені Тараса Шевченка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070944

**Місцезнаходження:** 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

**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. Молекулярна динаміка тирозил-тРНК синтетази еубактерії *Mycobacterium tuberculosis* та формування метастабільних елементів в активному центрі
2. Molecular dynamics of *Mycobacterium tuberculosis* tyrosyl-tRNA synthetase and formation of metastable elements in the active site

**Реферат:**

1. Дисертацію присвячено дослідженню молекулярної динаміки тирозил-тРНК синтетази еубактерії *Mycobacterium tuberculosis* у водно-іонному розчині. Проведено дослідження динаміки ферменту у вільному стані, у комплексах з різними субстратами та інгібіторами. Вперше показано динамічне формування антипаралельних стрендів у неструктурованій каталітичній KMSKS-подібній петлі, яка характерна для аміноацил-тРНК синтетаз класу I. Виявлено, що структури, які динамічно формуються у ході динаміки ферменту, підтримують каталітичну петлю в "закритій" конформації, спрямовуючи каталітичний KMSKS-подібний мотив у активний центр. Проведено дизайн нових інгібіторів ферменту на основі структури відомого інгібітора тирозил-тРНК синтетаз бактерій SB-219383.

2. The present study is dedicated to the investigation of molecular dynamics of Mycobacterium tuberculosis tyrosyl-tRNA synthetase in water-ion solution. The work studied the dynamics of enzyme in the free state and in complexes with different substrates and inhibitors. It has been shown for the first time dynamic formation of antiparallel strands in unstructured KMSKS-like catalytic loop, which is typical for class I of aminoacyl-tRNA synthetases. It was found that  $\beta$ -strands dynamically forming in the course of enzyme molecular dynamics kept catalytic loop in "closed" state, directing KMSKS-like catalytic motif into the active site. Based on structure of bacterial tyrosyl-tRNA synthetase inhibitor SB-219383, design of new inhibitors of the enzyme was conducted.

**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. Корнелюк Олександр Іванович

2. Kornelyuk Aleksandr Ivanovich

**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

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

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Білан Павло Володимирович
2. Білан Павло Володимирович

**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. 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**

Держинський Микола Едуардович

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

Держинський Микола Едуардович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.