Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U000883

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-03-2008

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:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.14

Назва наукової спеціальності: Теплофізика та молекулярна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 26-02-2008

Спеціальність за освітою: 8.070101

Місце роботи здобувача: 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

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, 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: 29.29.19

Тема дисертації:

1. Роль протиіонів лужних металів у конформаційній динаміці двоспіральних полінуклеотидів

2. Role of alkali metal counterions in the conformational dynamics of double helical polynucleotides

Реферат/анотація:

1. У дисертації молекула двоспірального полінуклеотиду з протиіонами лужних металів розглядається, у вигляді гратки іонного кристалу. Динаміка такої гратки досліджувалася в рамках підходу чотирьох мас Волкова і Косевича і теорії іонних кристалів. Для визначення електростатичних взаємодій між зарядами подвійної спіралі та протиіонами розроблено спеціальний підхід для оцінки діелектричної проникності іон-гідратного шару полінуклеотиду та константи Маделунга іон-фосфатної гратки. Отримані значення діелектричної проникності змінюються від 2,3 до 2,6, залежно від типу протиіона. Значення константа Маделунга виявилися близькими до значення одновимірного кристалу (1,386). В результаті показано, що в низькочастотному спектрі двоспіральних полінуклеотидів повинна існувати мода коливань протиіонів відносно фосфатних груп остова подвійної спіралі. Розраховані частоти іон-фосфатних коливань для полінуклеотидів у висушеному стані та для полінуклеотидів у B- та A-формах подвійної спіралі з

протиіонами Li+, Na+, K+, Rb+та Cs+. Показано, що при збільшенні маси протиіону частота іон-фосфатних коливань зменшується від 250 до 95 см-1. Розрахунок амплітуд конформаційних коливань показав, що легкі протиіони (Li+, Na+ та K+), рухаючись відносно фосфатних груп остова макромолекули, не збурюють внутрішньої динаміки подвійної спіралі, а важкі протиіони (Rb+ та Cs+) примушують рухатися всі структурні елементи полінуклеотиду. Для спостереження моди іон-фосфатних коливань досліджувалися спектри комбінаційного розсіяння світла водних розчинів Na- та Cs-ДНК. Виявилося, що в обох спектрах спостерігається смуга 100 см-1, інтенсивність якої в спектрі Cs-ДНК майже вдвічі більша, ніж в спектрі Na-ДНК. Підсилення цієї смуги в спектрі Cs-ДНК пояснюється тим, що в неї потрапляє мода іон-фосфатних коливань. Спостереження моди іон-фосфатних коливань підтверджує можливість існування динамічної іон-фосфатної гратки в розчинах двоспіральних полінуклеотидів з протиіонами лужних металів.

2. In the thesis the molecule of the double helical polynucleotide with counterions of alkali metals is considered as as lattice of ion crystal. The dynamics of such a lattice is studied in frame of the four mass model approach by Volkov and Kosevich and using the theory of ion crystals. To determine the electrostatic interactions between charges of the double helix and counterions, the spasial approach for estimation of the dielectric constant of ion-hydrate shell of polynucleotide and the Madelung constant of ion-phosphate lattice is developed. The obtained values of the dielectric constant changes from 2,3 to 2,6, depending on counteriontype. The values of the Madelung constant appear close to the value of one-dimensional ion crystal (1,386). In the result it was shown that in the low-frequency spectra of the double helical polynucleotides the mode of counterion vibrations with respect of the phosphate groups of the double helix. The calculated frequencies of ion-phosphate vibrations for polynucleotides in dry state and for polynucleotides in B- and A-forms of the double helix with Li+, Na+, K+, Rb+ and Cs+ counterions. It was shown that the frequency of ion-phosphate vibrations decreases from 250 до 95 см-1 as the counterion mass increases. The calculations of the amplitudes of conformational vibrations show that light counterions (Li+, Na+ and K+) moving with respect to the phosphate groups do not disturb the internal dynamics of the double helix, but heavy counterions (Rb+ and Cs+) make move all structure elements of polynucleotide. To observe the mode of ion-phosphate vibrations the Raman spectra of DNA water solutions with Na+ and Cs+ are studied. It was shown that in the both spectra the band 100 cm-1 is observed. The intensity of this band in the spectra of Cs-DNA is about twice higher than in the spectra of Na-DNA. In thesis it is shown that the intensification of this band in the spectra of Cs-DNA is caused because the mode of ion-phosphate vibrations is inside this band. Observation the mode of ion-phosphate vibrations proves the existence of the dynamical ion-phosphate lattice in the solutions of double helical polynucleotides with alkali metal counterions.

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. Булавін Леонід Анатолійович

2. Bulavin Leonid Anatolievich

Кваліфікація: д.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. Погорєлов Валерій Євгенійович

2. Погорєлов Валерій Євгенійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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. Семенов Михайло Олексійович

2. Семенов Михайло Олексійович

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 Єжов Станіслав Миколайович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Єжов Станіслав Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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