

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0404U003244

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-07-2004

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Краснокутський Сергій Анатолійович

2. Krasnokutskiy Sergij A.

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: 25-06-2004

Спеціальність за освітою: 7.070101

Місце роботи здобувача: Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І.Веркіна

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: 61164, Україна, м. Харків, пр. Науки, 47

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 64.051.13

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: Фізико-технічний інститут низьких температур ім.

Б.І.Веркіна

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: 61164, Україна, м. Харків, пр. Науки, 47

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 34.17

Тема дисертації:

1. Молекулярна структура мономерних фрагментів нуклеїнових кислот, ізольованих у низькотемпературних інертних матрицях

2. Molecular structure of nucleic acid monomeric fragments isolated in the low temperature inert matrix

Реферат:

1. Об'єкт дослідження: нуклеозиди: тимідин, 2'-дезоксіуридин, уридин; модифікований нуклеозид з антивірусною та протипухлинною активністю - сінцитол; цукри: рибоза, 2-дезоксірибоза; азотисті основи: 1-метил-урацил, 1-метил-тимін. Мета дослідження: встановлення конформації нуклеозидів, а також нового нуклеозидного аналогу, що має високу антивірусну активність, сінцитолу. Методи дослідження: ІЧ-Фур'є-спектроскопія матричної ізоляції та квантово-хімічні розрахунки методами Хартрі-Фока та Мюлера-Плесета. Конформаційну рівновагу біомолекул було досліджено на підставі порівняльного аналізу експериментальних та теоретичних результатів. Теоретичні і практичні результати: геометричні параметри, коливальні спектри азотистих основ та цукрів, квантово-хімічний аналіз конформаційної рівноваги нуклеозидів; молекулярні структури 1-метилурацилу, 1-метилтиміну, тимідину, уридину, рибози, 2-дезоксірибози в ізольованому стані. Встановлено співвідношення та термодинамічні параметри різних

конформерів для всіх молекул, що вивчалися, в ізольованому стані. Досліджено конформації нового нуклеозидного лікарського препарату з антивірусною та протипухлинною активністю - сінцитолу. Новизна: інфрачервоні Фур'є-спектри матрично-ізолюваних молекул (рибози, 2-дезоксірибозит, тимідину та уридину) та їх докладне квантово-хімічне моделювання; процентне співвідношення різних конформерів для всіх молекул, що вивчалися, та їх термодинамічні параметри в ізольованому стані; в ізольованому стані син-конформація пиримідинових нуклеозидів, що досліджувались, стабілізована внутрішньомолекулярним водневим зв'язком O5'H...O2, а анти-конформація уридину стабілізована водневим зв'язком O2'H...O2. Запропоновано модель антивірусної дії нового нуклеозидного аналогу - сінцитолу. Ступінь упровадження: отримані результати можуть використовуватись при розробці антивірусних лікарських препаратів на основі нуклеозидів, для аналізу можливостей сучасних квантово-хімічних програм, розрахунків та моделювання процесів внутрішньо- та міжмолекулярних взаємодій. Сфера (галузь використання): молекулярна біофізика, медична фізика та фармакологія.

2. The object of the research of the thesis is nucleosides: thymidine, 2'-deoxyuridine, uridine; a modified nucleoside with antiviral and antitumoral activity - syncytol; sugars: a ribose, 2-desoxyribose; nucleic bases: 1-methyl-uracile, 1-methyl-thimine. The purpose of research: finding-out of a conformation of nucleosides, and also new modified nucleoside with antiviral activity, syncytol. Such research methods and instrumentation as Fourier-transform IR spectroscopy of matrix isolation and quantum chemical calculations by methods of a Hartree-Fock and Moller-Plesset were used in the thesis. The conformational equilibrium of biomolecules was studied ground of comparative analysis of experimental and theoretical results. Theoretical and practical results of the research are geometrical parameters, vibration spectra of nitrogen bases and sugars and also quantum chemical analysis of a conformational equilibrium of nucleosides; molecular structures of 1-methyluracile, 1-methylthimine, thymidine, uridine, ribose, 2-desoxyribose in an isolated state. The ratio and thermodynamic parameters of different conformers for all studied molecules in an isolated condition are established. The conformations new nucleoside with antiviral and antitumoral activity - syncytol are investigated. Novelty: Fourier-transform IR spectroscopy of matrix isolated molecules (ribose, 2-desoxyribose, thymidine and uridine) and their quantum chemical simulation; a percentage ratio of different conformers for all molecules, which one were studied, and their thermodynamic parameters in an isolated state; in an isolated state a syn-conformation of pyrimidine nucleosides is stabilized by an intramolecular hydrogen binding O5'H...O2, and the anti-conformation of uridine is stabilized by a hydrogen binding O2'H...O2. The model of antiviral action of a new nucleoside - syncytol is offered. The results of the thesis have been introduced at mining antiviral drugs on the basis of nucleosides and for the analysis of capabilities of the modern quantumchemical programs, calculations both simulation of processes inside and intermolecular interactions. The field of usage of practical development is a molecular biophysics, medical physics 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 ОПВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Благой Юрій Павлович

2. Blagoi Yuri P.

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Зав'ялова Оксана Стефанівна

2. Зав'ялова Оксана Стефанівна

Кваліфікація: к.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**

Малеев Володимир Якович

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

Малеев Володимир Якович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.