

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U004013

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-11-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ковальський Дмитро Борисович

2. Kovalsky Dmytro Borisovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 03.00.03

Назва наукової спеціальності: Молекулярна біологія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 25-10-2005

Спеціальність за освітою: 7.070301

Місце роботи здобувача: Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417105

Місцезнаходження: 03143 м.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 26.237.01

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут молекулярної біології і генетики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417101

**Місцезнаходження:** вул. Акад. Заболотного, 150, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут молекулярної біології і генетики НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417105

**Місцезнаходження:** 03143 м.Київ, вул.Заболотного, 150

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 34.03.23

**Тема дисертації:**

1. Вплив дистальних мутацій на конформаційну рухливість ВІЛ-1 протеази: дослідження методом молекулярної динаміки

2. Effect of Distal Mutations on Conformational Behavior of HIV-1 Protease: Molecular Dynamics Simulations Study.

**Реферат:**

1. Вперше, методом молекулярної динаміки (МД) проведено систематичне вивчення конформаційної рухливості нативної ВІЛ-1 протеази за різних умов середовища та вивчення впливу дистальних мутацій L10I, L90M, A71V/G73S/I93L та E35Q/M36I/S37D/R57K на її конформаційну рухливість як, механізм резистентності до інгібіторів. Показано, що конформаційна стабільність димеру протеази суттєво залежить від протонного стану каталітичної діади Asp25/25'. Вперше встановлено два механізми впливу дистальних мутацій на конформаційні коливання ВІЛ-1 протеази - через перерозподіл узгоджених рухів та через зміну доступних конформаційних рухів. Розроблено алгоритми порівняння даних методів ЯМР да МД. Розроблено алгоритми порівняння динамічних характеристик двох білків з даних розрахунку МД. Розроблено універсальну схему вивчення впливу дистальних мутацій на конформаційну поведінку білків.

Отримані дані можуть бути використані для розробки інгібіторів ВІЛ-1 протеази нового покоління, активних як проти нативної протеази так і її певних резистентних типів.

2. The molecular dynamics simulation technique was used to perform the systematic investigation of the conformational behavior of native HIV-1 at different environmental conditions and to study the effect of distal mutations L10I, L90M, A71V/G73S/I93L та E35Q/M36I/S37D/R57K on its conformational dynamics as mechanism of drug resistance. It is shown that the structural stability of the protease dimer is largely dependent on the protonation state of the catalytic dyad Asp25/25'. It is established the existence of two mechanisms of the effect of distal mutations on MD of HIV-1 protease -- through the redistribution of its correlated motions and through the changes of the available conformational motions of the enzyme. The algorithm to compare NMR and MD derived data is developed. The algorithm to compare dynamical characteristics of two proteins is developed. Results of the study could be used to design inhibitors of HIV-1 protease of new generation that will be active against native as well as certain drug resistant types of the enzyme.

**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 Alexander Ivanovich

**Кваліфікація:** д.б.н., 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

## **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., 03.00.03

**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. Кібірев Володимир Костянтинович
2. Кібірев Володимир Костянтинович

**Кваліфікація:** д.б.н., 03.00.04

**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**

Ельська Ганна Валентинівна

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

Ельська Ганна Валентинівна

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.