Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0420U100464

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-03-2020

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Здоревський Олексій Олександрович

2. Zdorevskyi Oleksii O.

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 27-02-2020

Спеціальність за освітою: фізика

Місце роботи здобувача: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: вул. Метрологічна, буд.14-Б, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

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 26.191.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: вул. Метрологічна, буд.14-Б, 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 теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Код за ЄДРПОУ: 05417124

Місцезнаходження: вул. Метрологічна, буд.14-Б, м. Київ, Київська обл., 03143, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29.25

Тема дисертації:

1. Конкурентна взаємодія молекул пероксиду водню та води з центрами впізнавання макромолекули ДНК

2. Competitive interaction of hydrogen peroxide and water molecules with recognition sites of DNA macromolecule

Реферат/анотація:

1. В роботі досліджено конкурентну взаємодію молекул пероксиду водню (H2O2) та води з центрами неспецифічного (фосфатними групами остову ДНК) і специфічного (нуклеїнові основи і пари основ) впізнавання макромолекули ДНК. Для розрахунків використовуються методи атом-атомних потенціальних функцій, а також квантової механіки молекул. Розглянуто комплекси, що складаються з фосфатних груп ДНК, нуклеїнових основ Аденіну (A), Тиміну (T), Гуаніну (G) і Цитозину (C), а також пар основ AT і GC з молекулами H2O2 і H2O. Результати розрахунку показали, що молекула пероксиду водню може утворювати комплекс з фосфатною групою ДНК, який є не менш стабільний та більш довгоживучий, ніж аналогічний комплекс з молекулою води. Знайдено конкретні атомні групи нуклеїнових основ, які є більш енергетично вигідними для утворення стабільного комплексу з молекулою пероксиду водню, ніж з молекулою води. Також показано, що існують певні конфігурації пар основ AT і GC ('привідкриті' та 'розтягнуті'), які стабілізуються молекулою пероксиду водню суттєво краще, ніж молекулою води. Показано, що такі стани

можна спостерігати в експериментах з анзіпінгу ДНК за допомогою методів мікроманіпулювання окремою молекулою. Тому ці методи можуть бути використані для експериментального спостереження взаємодії пероксиду водню з макромолекулою ДНК. Формування таких комплексів може блокувати процеси впізнавання ДНК ферментами і, отже, блокувати процеси передачі генетичної інформації в ракових клітинах в процесі терапії онкологічних захворювань пучками важких іонів.

2. Competitive interaction of hydrogen peroxide (H2O2) and water molecules with nonspecific (phosphate groups of the DNA backbone) and specific (nucleic bases and base pairs) DNA recognition sites is studied. Atomic-atomic potential functions method as well as quantum mechanics are used for the calculations. Complexes consisting of DNA phosphate groups, nucleic bases Adenine (A), Thymine (T), Guanine (G) and Cytosine (C), as well as AT and GC base pairs with H2O2 and H2O molecules are considered. The calculation results showed that hydrogen peroxide molecule can form a complex with DNA phosphate group, which is no less stable and more long-living than a similar complex with water molecule. Specific atomic groups of nucleic bases that are more energetically advantageous for the formation of a stable complex with hydrogen peroxide molecule than with water molecule are found. It has also been shown that there are certain configurations of AT and GC base pairs ('open' and 'stretched') that are stabilized by hydrogen peroxide molecule significantly better than by water molecule. It has been shown that such states can be observed in DNA unzipping experiments using single-molecule micromanipulation techniques. Therefore, these methods can be used to observe experimentally the interaction of hydrogen peroxide molecules with DNA. The formation of such complexes can block the DNA recognition by enzymes and, therefore, block the genetic information transfer processes in cancer cells during ion beam therapy treatment.

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. Волков Сергій Наумович
2. Volkov Sergej N

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Чалий Олександр Васильович
2. Chalyi Alexander V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шестопалова Ганна Вікторівна
2. Shestopalova Anna V.

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	Загородній Анатолій Глібович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Загородній Анатолій Глібович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.