

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Май Бить Зунг «Изучение методами ИК-спектроскопии, квантовой химии и молекулярной динамики строения и спектральных особенностей сильных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 03.01.02 – биофизика.

Диссертационная работа Май Бить Зунг посвящена актуальной проблеме – изучению строения, динамики и спектральных свойств молекулярных комплексов с сильными водородными связями в биологических системах. Актуальность исследования обусловлена, в первую очередь, фундаментальными задачами биофизики. Кроме того полученные данные могут быть использованы в смежных областях науки для решения задач супрамолекулярной химии, создания фармакологических препаратов нового поколения и др. Исследования молекулярных комплексов с сильными водородными связями осложняется тем, что подобные комплексы не существуют в газовой фазе или в изолированном состоянии. Кроме того, это динамические системы, представляющие собой комплексы с переносом протона.

Для детального изучения структуры и динамики комплексов на атомном уровне в диссертационной работе был применен оригинальный подход, основанный на сочетании расчетных и экспериментальных методов. В качестве объекта был выбран комплекс гуанидин-ацетат, а также ряд аминокислот. Новизна методики заключается в комбинации методов квантовой химии и классической молекулярной динамики с верификацией результатов расчета методом ИК-спектроскопии. Высокая чувствительность ИК-спектроскопии к системе водородных связей в сочетании с высокой точностью расчетных методов позволила автору получить, безусловно, важные результаты на современном уровне. Отдельную ценность представляют результаты приводимого автором тестирования силовых полей и континуальных моделей растворителя и основательный анализ их применимости к системам с сильными водородными связями.

В целом автореферат производит впечатление законченной исследовательской работы. Есть небольшие замечания. Так, вызывает сомнение отнесение полосы при 1750 см^{-1} в спектре цвиттер-иона глицина к колебаниям С=О группы, поскольку карбоксильная группа в используемых моделях, а также в водном растворе, находится в диссоциированном состоянии. Присутствуют небольшие опечатки. Неаккуратность в расшифровке используемых сокращений, например, автор использует аббревиатуру для теории функционала плотности – DFT – без разъяснений, а сокращение для молекулярной динамики - МД – по тексту расшифровано дважды. Полагаем, впрочем, что все эти

недостатки обусловлены лишь сжатым объемом автореферата, но их нет в самой диссертационной работе.

Считаем, что данная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор Май Бить Зунг несомненно заслуживает присуждения искомой степени кандидата биологических наук по специальности 03.01.02 – биофизика.

25 октября 2016 года

К.б.н., научный сотрудник
Лаборатории биофизической химии наносистем
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Казанский институт биохимии и
биофизики Казанского научного центра
Российской академии наук

О.Н. Макшакова

420111, г. Казань, ул. Лобачевского 2/31, 8 (843) 2319037, makshakova@kibb.knc.ru

Заместитель директора
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Казанский институт биохимии и
биофизики Казанского научного центра
Российской академии наук
доктор химических наук, профессор

Ю.Ф. Зуев

420111, г. Казань, ул. Лобачевского 2/31, 8 (843) 2319036, zuev@kibb.knc.ru

