

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Май Бить Зунг на тему: «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.

Природа водородных связей, их физико-химические особенности являются одним из фундаментальных вопросов, которые находятся в основе различных научных концепций исследования жидких систем. Поэтому многосторонние исследования водородных связей в жидких средах, а именно - получение динамических и спектральных свойств, всегда имели и будут иметь принципиальную важность для дальнейшего развития теории жидкого состояния вещества. Наиболее значимыми особенностями водородного связывания являются в процессах изучения сольватации белков и пептидов в водной среде. А это означает, что исследования, проведенные Май Б. З. безусловно актуальны.

В своей работе диссертант использовал совокупность экспериментальных и численных методов, которые позволили всесторонне исследовать характер водородного связывания водных растворов глицина, пролина, фенилаланина и комплекса гуанидин-ацетат. Полученные результаты очень подробно приведены в автореферате в виде графиков и таблиц. Компетентное обсуждение результатов и сделанные на их основе выводы не только обладают общетеоретической значимостью в плане исследования жидкого состояния вещества, но и имеют перспективы практического применения при синтезе кристаллов медицинского назначения.

Материал изложен простым и понятным языком, полностью соответствует заявленному названию работы, её целям и задачам.

При ознакомлении с авторефератом возникло замечание.

В таблице 2 приведены результаты автора диссертации по средним числам водородным связям с использованием различных силовых полей в сравнении величинами, полученными из интегральных уравнений RISM: во-первых, к сожалению, отсутствует ссылка на эти величины; во-вторых, методом RISM получают координационное число, которое заведомо будет больше чем, среднее число водородных связей.

Приведенное замечание не затрагивает существа работы, которая представляет собой законченное научное исследование, выполненное на современном уровне, и отвечает

