

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 учёной степени кандидата биологических наук по специальности 03.01.02 – биофизика.

Диссертация посвящена разработке методов исследования строения систем с сильными межмолекулярными водородными связями типа N-H⁺...O в водных и других плотных средах при использовании ИК-спектроскопии, квантовой химии и молекулярной динамики. Это позволяет, в частности, используя достаточно простые методы исследования (регистрация ИК спектров) получить информацию о строении сложных систем (например, белков) в водных растворах, что, с одной стороны представляет несомненный интерес для биологических и медицинских исследований, а, с другой стороны, такую информацию сложно получить при помощи других современных методов.

Особую ценность представляет предложение рассматривать область 2900 – 1800 см⁻¹ в спектрах растворов, традиционно обходимой исследователями. Между тем, в настоящей работе показано, что полосы в данной области могут характеризовать особенности строения изучаемых комплексов, а также сольватной оболочки.

К недостаткам работы следует отнести некоторую скудность экспериментального материала, не смотря на заявленный в названии метод. В частности, в автореферате приведены расчеты ИК спектров глицина, фенилаланина, пролина и комплекса гуанидин-ацетата в водных растворах, однако, сравнение с экспериментальными данными приведены лишь для последнего. Вероятно, следовало бы провести сравнение хотя бы с результатами, полученными в литературе. Также в автореферате не обсуждается выбор метода НПВО, его достоинства и недостатки. Надеюсь также, что в самой диссертации приведены экспериментальные спектры чистого растворителя (воды), полученные в работе, для оценок его влияния на спектры самих веществ.

Не смотря на указанные недостатки, автореферат диссертации Май Бить Зунг удовлетворяет требованиям, предъявляемым к авторефератам к кандидатским диссертациям, и Май Бить Зунг заслуживает присуждения искомой степени кандидата биологических наук.

Доцент кафедры Молекулярной спектроскопии
Санкт-Петербургского государственного университета
Кандидат физико-математических наук

Личную подпись
заверяю, начальник
отдела кадров
Н.И. МАШТЕПА



Асфин Р.Е.
Тел. +7 (812) 428-3870
Email: R.Astfin@spbu.ru
Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
spbu.ru/science/expert.html