

О Т З Ы В

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

Водородные связи играют важную роль в стабилизации пространственной структуры и определении специфических свойств большинства биологических систем, процессах самоорганизации молекулярных систем в конденсированных средах и сольватации белков и пептидов. Образование межмолекулярной N-связи является необходимой стадией большинства реакций переноса протона, во многих физических, химических и биологических процессах, а так же в кислотно-основных взаимодействиях. Одним из надежных методов исследований характеристик N-связей в биологических объектах является совместное использование физических методов. В связи с вышеизложенным, актуальность диссертационной работы Май Бить Зунг не вызывает сомнений.

Цель исследования адекватно отражает тематику работы. Поставленные задачи конкретны, четко сформулированы и соответствуют цели исследования.

В качестве объектов исследования соискателем выбраны водные растворы аминокислот с нейтральной боковой цепью и гуанидин-ацетат. Выбор объекта обоснован тем, что комплекс гуанидин-ацетат в воде является наиболее простой моделью, удобной для разнообразных теоретических исследований, включая МД-моделирование, солевых мостиков. Этот комплекс представляет собой реальную систему с короткими межмолекулярными N-связями.

В выполненном исследовании соискателем изучены строение и спектральные свойства сильных межмолекулярных N-H⁺...O связей в водных растворах цвиттер-ионов аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат. Использованный в работе подход заключается в сочетании методов ИК-спектроскопии, теории функционала плотности с учетом растворителя и МД с классическими силовыми полями. Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений, т.к. обеспечивается высоким техническим уровнем проведения спектральных измерений и одновременным использованием методов квантовой химии и МД, тщательным анализом расчетных

характеристик, согласованием полученных результатов с результатами близких по тематике работ.

Приведенный в автореферате список, опубликованных автором, работ соответствует содержанию диссертационной работы. Результаты диссертационного исследования отражены в 6 публикациях, в том числе 3 статьях, входящих в список ВАК РФ и базу Web of Science.

Считаю, что диссертационная работа 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» по объему исследованного материала, его новизне и практической ценности полученных результатов соответствуют требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук (п. №9 «Положение о присуждении ученых степеней ВАК РФ № 842 от 24.09.2013г.), а ее автор заслуживает присвоение ему ученой степени кандидата биологических наук по специальности 03.01.02 – биофизика.

Скоркина Марина Юрьевна,
доктор биологических наук, доцент,
профессор кафедры биологии
института инженерных технологий
и естественных наук ФГАОУ ВО «Белгородский
государственный национальный
исследовательский университет»

308015, г. Белгород, ул. Победы, 85
раб. тел. (4722)30-11-63
моб. тел. 89202087007
e-mail: skorkina@bsu.edu.ru

24.10.2016

