

Протокол № 53
заседания диссертационного совета Д 212.038.03
при Воронежском государственном университете
от 28 ноября 2016 г.

Состав диссертационного совета утвержден в количестве 19 человек. На заседании присутствовало 13 членов совета, в том по специальности – 5 докторов наук.

Защита 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

Вопросы по защищаемой диссертации заданы:

1. д.б.н., доц. Вашанов Г. А.;
2. д.м.н., проф. Алабовский В. В.;
3. д.б.н., проф. Артюхов В. Г.;
4. д.б.н., доц. Путинцева О. В.

В дискуссии приняли участие:

1. д.б.н., доц. Вашанов Г. А.;
2. д.б.н., проф. Артюхов В. Г.;
3. к.б.н., Абдуллатыпов А. В.

Результаты голосования по вопросу о присуждении ученой степени кандидата биологических наук Май Бить Зунг:

«за» - 13,

«против» - нет,

недействительных бюллетеней – нет.

(протокол счетной комиссии прилагается)

Председатель диссертационного совета
Д 212.038.03
д.б.н., профессор

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.038.03
д.б.н., профессор



Артюхов В.Г.

Грабович М.Ю.

28.11.2016

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.038.03 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»,
МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 28.11.16 № 53

О присуждении Май Бить Зунг, гражданину Вьетнама, ученой степени кандидата биологических наук.

Диссертация «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 специальности 03.01.02 – биофизика принята к защите 26.09.2016 г., протокол № 49, диссертационным советом Д 212.038.03 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет», Министерство образования и науки РФ, 394018, г. Воронеж, Университетская площадь, 1; приказ №717/нк от 09.11.2012.

Соискатель Май Бить Зунг, 1986 года рождения, аспирант очной формы обучения Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет», Министерство образования и науки РФ. В 2012 году окончила федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» с присуждением степени магистра по направлению "биология".

Диссертация выполнена на кафедре квантовой химии факультета естественных наук ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева» и на кафедре генетики, цитологии и биоинженерии медико-биологического факультета ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Министерство образования и науки РФ.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент Венер Михаил Владимирович, ФГБОУ ВО «Российский химико-технологический университет имени Д. И. Менделеева», факультет естественных наук, кафедра квантовой химии, доцент.

Научный консультант – доктор биологических наук, профессор Попов Василий Николаевич, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», медико-биологический факультет, кафедра генетики, цитологии и биоинженерии, заведующий.

Официальные оппоненты:

Ефремов Роман Гербертович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБУН Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, лаборатория моделирования биомолекулярных систем, заведующий;

Абдуллатыпов Азат Вадимович, кандидат биологических наук, ФГБУН Институт фундаментальных проблем биологии РАН, лаборатория биотехнологии и физиологии фототрофных организмов, научный сотрудник.

- дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: НИИ физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского Московского государственного университета, г. Москва, в своем положительном заключении, подписанном Севериным Федором Федоровичем, доктором биологических наук, профессором, руководителем лаборатории молекулярной биологии дрожжей Научно-исследовательского института физико-химической биологии им. А.Н. Белозерского Московского государственного университета, указала, что диссертация 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» является самостоятельным законченным научным исследованием и соответствует специальности 03.01.02 – биофизика, отвечает требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 как научная квалификационная работа, в которой содержится решение актуальной задачи по исследованию строения и спектральных особенностей сильных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат.

Соискатель имеет 6 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 6; работ опубликованных в рецензируемых научных изданиях - 3. Работы посвящены исследованию строения и спектральных особенностей сильных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат методами ИК-спектроскопии, квантовой химии и классической молекулярной динамики. В ряде публикаций отражены специфика строения и спектральные особенности сильных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат. Авторский вклад составляет 85%. Общий объем - 1,75 печ. л.

Наиболее значительные научные работы:

1. Levina E.O. Spectral features of contact ion pairs. the combined ATR-IR and theoretical study of guanidinium acetate / E.O. Levina, B.V. Lokshin, B.D. Mai, M.V. Vener // Chem. Phys. Lett. – 2016. – V. 659. – P. 117-120.
2. Koloskov O.O. Classical MD simulations of the IR spectra of amino acids with neutral residues in water. Reassignment of the band around 2300 cm^{-1} / O.O. Koloskov, E.O. Levina, B.D. Mai, M.V. Vener // Сорбционные и хроматографические процессы. Воронеж, 2016. – Т. 16, Вып. 4. – С. 556-562.
3. Венер М.В. Спектральные особенности контактной ионной пары гуанидин-ацетат в воде. Исследование методами НПВО и теории

функционала плотности / М.В. Венер, В.Н. Попов, Б.З. Май, Б.В. Локшин // Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация. 2016. № 3 – С. 58-62.

На диссертацию и автореферат поступило 5 отзывов от: 1) доцента кафедры молекулярной спектроскопии физического факультета ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет» к. ф.-м.н., доцента Асфина Р. Е.; 2) научного сотрудника лаборатории биофизической химии наносистем ФГБУН «Казанский институт биохимии и биофизики Казанского научного центра РАН» к.б.н., Макшаковой О.Н.; 3) профессора кафедры биологии Института инженерных технологий и естественных наук ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет» д.б.н., доцента, Скоркины М.Ю.; 4) профессора кафедры аналитической химии химического факультета ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет» д.х.н., профессора Бутырской Е.В.; 5) старшего научного сотрудника ФГБУН «Институт химии растворов РАН» к. ф.-м.н., Петренко В.Е.

Все отзывы положительные. Содержащиеся в отзывах замечания носят рекомендательный характер, или затрагивают стилистические и терминологические недостатки.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается высокой квалификацией рецензентов по тематике диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

Предложен новый подход для исследования строения и спектральных особенностей межмолекулярных Н-связей в водных растворах ряда аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат.

Доказано, что для изучения строения и спектральных особенностей сильных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат совместное использование методов ИК-спектроскопии, квантовой химии и классической молекулярной динамики является эффективным

подходом, поскольку указанные методы взаимно дополняют друг друга и позволяют получить полезную информацию о структуре, динамике и спектральных особенностях сильных Н-связей в исследуемых объектах.

Определена природа сильных Н-связей в кластерах «аминокислота-вода» и в водном растворе гуанидин-ацетат, а также выявлены их спектральные особенности.

Введены представления о природе межмолекулярных Н-связей в водных растворах биологических молекул.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Доказано, что полученные результаты вносят вклад в дополнение подходов исследования межмолекулярных Н-связей, также расширяют и углубляют представления о природе межмолекулярных взаимодействий в белках и пептидах.

Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов)

Использованы методы квантовохимических расчетов и модель поляризуемого континуума с неявным учетом растворителя, метод классической молекулярной динамики с явным учетом растворителя, метод ИК-спектроскопии нарушенного полного внутреннего отражения.

изложены доказательства проявления сильных межмолекулярных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат.

Раскрыты особенности строения и спектральных характеристик сильных межмолекулярных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

Внедрен новый подход к изучению межмолекулярных сильных Н-связей в водных растворах аминокислот и комплекса гуанидин-ацетат, который основан на сочетании современных методов компьютерного моделирования и экспериментальных методов.

определены перспективы практического использования полученных результатов, которые могут быть использованы при нековалентном синтезе наноструктур и кристаллов лекарственного назначения.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

экспериментальные результаты, представленные в диссертационной работе, получены с использованием современного Фурье-спектрометра с высокой чувствительностью.

Расчетные результаты получены с использованием надежных вычислительных методов.

Теория построена на новых данных, согласуется с опубликованными результатами по экспериментальным и теоретическим исследованиям межмолекулярных Н-связей.

Установлено качественное и количественное соответствие авторских результатов с данными, представленными в независимых источниках по изучению строения и спектральных особенностей сильных Н-связей.

Личный вклад соискателя состоит в изучении современной научной литературы по теме исследования, непосредственном участии в получении, обсуждении и интерпретации полученных результатов. Материалы диссертации были доложены: на Всероссийских научно-практических конференциях.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, непротиворечивой методологической платформой, концептуальностью и взаимосвязью выводов.

В диссертации Май Бить Зунг соблюдены установленные Положением о присуждении ученых степеней критерии, которым должна отвечать диссертация на соискание ученой степени кандидата наук.

В диссертации Май Бить Зунг отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

На заседании 28.11.2016 диссертационный совет принял решение присудить Май Бить Зунг ученую степень кандидата биологических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 13 человек, из них 5 докторов наук (по специальности рассматриваемой диссертации), участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» - 13, «против» - нет, недействительных бюллетеней - нет.

Председатель
диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета

28 ноября 2016 г.



Артюхов
Валерий Григорьевич

Грабович
Маргарита Юрьевна