

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертацію

Столярик Оксани Дмитрівни «Специфіка поведінки водно-солевих

розчинів альбуміну та плазми крові людини і інших ссавців»,

подану на здобуття ступеня доктора філософії

за спеціальністю 104-фізика та астрономія

Актуальність тематики дослідження.

Проблема кислотно-лужного балансу водних розчинів належить до числа актуальних міждисциплінарних напрямів сучасної фізики, фізичної хімії та біофізики. Водневий показник є однією з найважливіших характеристик водних систем, оскільки визначає перебіг значної кількості фізико-хімічних процесів, впливає на стан хімічної рівноваги, властивості біологічних макромолекул та функціонування живих організмів. Особливого значення набуває дослідження кислотно-лужного балансу фізіологічних розчинів і крові людини. Відомо, що показник рН крові підтримується в надзвичайно вузькому інтервалі значень, а навіть незначні його зміни можуть супроводжуватися порушенням біохімічних та фізіологічних процесів. При цьому водневий показник безпосередньо пов'язаний із зарядовим станом, конформацією та транспортними властивостями білків плазми крові, серед яких особливу роль відіграє людський сироватковий альбумін. Незважаючи на значну кількість експериментальних і теоретичних робіт, присвячених залежності рН від температури, концентрації електролітів та біомолекул, фізичні механізми формування кислотно-лужного балансу складних водно-солевих і білкових систем залишаються недостатньо з'ясованими. Зокрема, потребують подальшого дослідження роль міжмолекулярних взаємодій, водневих зв'язків, діелектричних властивостей середовища та їхній вплив на електрофізичні характеристики розчинів. У зв'язку з цим дослідження закономірностей формування водневого показника у водно-солевих розчинах альбуміну, крові людини та ссавців, а також встановлення зв'язку між кислотно-лужним балансом і електрофізичними властивостями білкових систем є актуальним науковим завданням, що має як фундаментальне, так і прикладне значення для біофізики, медицини та фізичної хімії.

Здобувачка не обмежилася аналізом наявних експериментальних даних щодо кислотно-лужного балансу водних та білкових розчинів, а запропонувала фізичний підхід до опису механізмів формування водневого показника з урахуванням міжмолекулярних взаємодій у водному середовищі. Важливим результатом роботи є встановлення закономірностей впливу температури, концентрації солей та альбуміну на значення рН, а також виявлення ролі водневих зв'язків і діелектричних властивостей середовища у формуванні кислотно-лужної рівноваги.

Особливий інтерес становить проведений аспіранткою аналіз взаємозв'язку між водневим показником та електрофізичними характеристиками білкових розчинів. У роботі показано, що зміна кислотно-лужного стану супроводжується зміною зарядового стану білкових макромолекул і, як наслідок, їх дзета-потенціалу. Це дозволило запропонувати фізичну інтерпретацію процесам, які традиційно розглядаються переважно з позицій біохімії та фізичної хімії, і розширити уявлення про механізми формування електрофізичних властивостей водно-солевих розчинів альбуміну та крові.

Структура і зміст дисертаційної роботи

Загальний обсяг дисертації становить 109 сторінок друкованого тексту. Робота містить 43 рисунки та 4 таблиці. Список використаних джерел містить 69 найменувань, викладених на 2 сторінках.

У вступі дисертаційної роботи авторкою належним чином обгрунтовано актуальність обраної тематики, сформульовано мету та основні завдання дослідження, визначено об'єкт, предмет і методи дослідження. Також наведено відомості щодо наукової новизни та практичного значення отриманих результатів.

Перший розділ присвячено аналізу сучасного стану досліджень у галузі фізико-хімічних властивостей води, механізмів формування кислотно-лужного балансу та електрофізичних властивостей альбуміну. Проведено ґрунтовний огляд літературних джерел, розглянуто особливості структури макромолекул альбуміну та процеси, що визначають їхню поведінку у водних розчинах. За результатами аналізу визначено коло наукових проблем, які потребують подальшого вивчення та стали предметом даної роботи.

У другому розділі описано головним чином механізм бінарних зіткнень, наслідком якого є дисоціація молекул води. В роботі отримано температурну залежність показника рН на основі моделі бінарних зіткнень і показано, що вона має активаційний характер. Для узгодження теоретичних і експериментальних значень враховано вплив поляризаційних ефектів. На основі теорії бінарних зіткнень молекул води виконано оцінку рН дистильованої води, а також здійснено теоретичний розрахунок показника рН за наявності розчиненого вуглекислого газу. Одержані теоретичні температурні залежності водневого показника порівняно з експериментальними даними, що дало змогу оцінити адекватність запропонованого підходу.

У третьому розділі описано роль водневого зв'язку у формуванні показника рН води. Показано, що значні повздовжні збудження водневого зв'язку сприяють розриву водневих зв'язків та процесам, що супроводжують утворення йонів гідроксонію. Поперечні коливання водневих зв'язків тісно пов'язані з розривом водневих зв'язків, і як наслідок, з тим, що значення зсувної в'язкості води за порядком величини є порівнянним із в'язкістю аргону. Отримані результати пояснюють деталі механізму формування рН, а також відносно слабкий прояв водневих зв'язків у формуванні термодинамічних і кінетичних властивостей води. Ці результати дають фізичне пояснення того факту, що бінодалі води і аргону є подібними одна до одної, що узгоджується з результатами, одержаними раніше Л.А. Булавіним, А.І. Фісенком і М.П. Маломужем.

У четвертому розділі розроблено коміркову модель для опису дзета-потенціалу водних розчинів альбуміну. На її основі отримано температурні та концентраційні залежності дзета-потенціалу, а також проведено їх зіставлення з експериментальними даними. Окрему увагу приділено аналізу взаємозв'язку між водневим показником та дзета-потенціалом білкових розчинів. Встановлено подібність між явищем формування дзета-потенціалу розчину альбуміну та явищем намагнічення парамагнетика. Для якісного опису відповідних закономірностей було використано модель Ландау для фазових переходів другого роду. Таким чином, встановлено характерний зв'язок між дзета-потенціалом та рН, який раніше був виявлений в роботах Б. Жачимської.

Зауваження та питання до дисертації

В якості зауважень до дисертаційної роботи можна відзначити наступне.

1. У роботі недостатньо детально висвітлено вплив поляризаційних ефектів на формування показника рН води та водних розчинів. Опонент усвідомлює складність цієї проблеми, однак саме її подальше дослідження може стати одним із перспективних напрямів удосконалення фізичного опису механізмів формування показника рН.
2. Потребує подальшого дослідження комплексний вплив температури, концентрації солі та показника рН на дзета-потенціал білкових розчинів. Зокрема, не повністю зрозумілим залишається, яким чином поєднано результати, наведені у роботах В.Ю. Бардіка, де досліджувалася температурна залежність дзета-потенціалу, та Б. Жачимської, у яких розглянуто залежність дзета-потенціалу від показника рН і концентрації солі. Подальше зіставлення та узагальнення цих результатів дозволило б більш повно обґрунтувати запропоновану модель.
3. У дисертації значну увагу приділено водним розчинам альбуміну та крові людини і ссавців. Водночас перспективним видається поширення запропонованих підходів на інші білкові системи та біологічні розчини, що дало б змогу більш повно оцінити межі застосовності розроблених моделей.

Наведені зауваження мають дискусійний характер і не впливають на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи, її наукову новизну та практичну цінність.

Загальний висновок про рівень набуття здобувачем теоретичних знань, відповідних умінь, навичок та компетентностей

Висловлені зауваження не знижують наукової цінності дисертаційної роботи та не впливають на її загальну позитивну оцінку. Більшість із них мають рекомендаційний або дискусійний характер і можуть бути використані авторкою під час подальшого розвитку досліджень за обраною тематикою. Під час виконання дисертаційного дослідження здобувачка продемонструвала ґрунтовні знання з молекулярної фізики, біофізики та фізики конденсованого стану речовини, а також здатність ефективно застосовувати сучасні теоретичні підходи для розв'язання складних наукових завдань. Авторка здійснила всебічний аналіз фізико-хімічних особливостей водних і білкових систем, опанувала методи математичного моделювання процесів, пов'язаних із формуванням кислотно-лужного стану та електрокінетичних характеристик розчинів.

Отримані результати свідчать про здатність здобувачки самостійно визначати актуальні напрями наукового пошуку, обґрунтовано обирати методи дослідження, здійснювати аналіз та інтерпретацію експериментальних і теоретичних даних, а також формулювати науково виважені висновки. Виконана робота підтверджує достатній рівень підготовки авторки до проведення самостійної науково-дослідної діяльності та розв'язання актуальних наукових проблем у відповідній галузі знань.

Висновок щодо відповідності дисертації нормам

Дисертаційна робота Столярик Оксани Дмитрівни на тему «Специфіка поведінки водно-сольових розчинів альбуміну та плазми крові людини і інших ссавців», представлена на здобуття ступеня доктора філософії, є завершеним самостійним науковим дослідженням, у межах якого отримано нові наукові результати, що мають теоретичне та практичне значення для подальшого розвитку молекулярної фізики, біофізики та фізики конденсованих середовищ.

У дисертації встановлено особливості формування кислотно-лужного стану водно-сольових розчинів альбуміну, плазми крові людини та інших ссавців. Досліджено вплив температури, сольового складу та концентрації білкових компонентів на значення водневого показника. Значну увагу приділено аналізу взаємозв'язку між кислотно-лужними характеристиками

середовища та електрокінетичними властивостями білкових систем, зокрема дзета-потенціалом. Отримані результати поглиблюють сучасні уявлення про механізми формування фізико-хімічних властивостей біологічних розчинів і можуть бути використані як підґрунтя для подальших фундаментальних та прикладних досліджень у галузі біофізики та фізики водних систем.

Вважаю, що за актуальністю, науковою новизною, теоретичним і практичним значенням отриманих результатів, обґрунтованістю висновків та повнотою їх висвітлення у наукових публікаціях дисертація відповідає вимогам пунктів. 6, 8 та 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12.01.2022 № 44 (зі змінами), а її авторка, Столярик Оксана Дмитрівна, заслуговує на присудження ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Офіційний опонент:

професор кафедри природничих наук

та інформаційних технологій

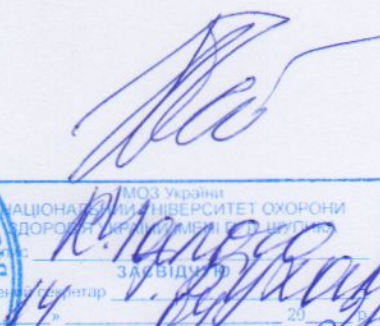
Національного університету

охорони здоров'я України

імені П.Л. Шупика,

доктор фізико-математичних наук,

професор



К.О. Чалий