

ВІДЗИВ ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

**на дисертацію Паппа Олександра Вікторовича
"Мас-спектрометрія процесів іонізації та дисоціативної іонізації
молекул амінокислот електронами",
представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-
математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка**

Дисертаційна робота О.В. Паппа присвячена дослідженню однієї з найбільш динамічних і цікавих галузей сучасної фізичної науки – фізики зіткнень низькоенергетичних електронів з молекулами біологічного призначення. Вказані елементарні процеси взаємодії низькоенергетичних електронів з біологічними молекулами, які входять в структуру живих організмів, є предметом всебічного та глибокого вивчення. На сьогодні накопичено велику кількість нових даних про перебіг та характеристики фізичних явищ, що мають місце при пружному і непружному розсіюванні електронів на складних молекулярних сполуках. Взаємодія повільних електронів з електронними оболонками молекул-мішеней призводить до утворення принципово нових структур, які характеризуються наявністю збуджених та розлітних станів вихідних молекул. Розпад станів цих молекул відбувається з формуванням нових молекулярних утворень і несе у собі важливу інформацію про поведінку процесів біохімічного характеру в клітині під дією іонізуючого випромінювання. Вибір амінокислот у якості досліджуваних об'єктів є, безумовно, виправданим, оскільки вони, будучи структурними одиницями білків, є одними з найбільш вразливих компонентів живих клітин з точки зору дії на них іонізуючого випромінювання.

Вказані вище процеси елементарної взаємодії повільних електронів зі складними багатоатомними молекулами становлять інтерес з точки зору моделювання реакцій обміну енергією на клітинному рівні. Деградація живих клітин пов'язана з прямою дією іонізуючого випромінювання високої енергії, з незворотними змінами при утворенні хімічно-активних радикалів у великій кількості, а також з виникненням канцерогенних змін у живих тканинах. У той же час більшість подібних змін викликана саме вторинними, низькоенергетичними електронами, здатність яких до руйнування складових амінокислот призводить до фатальних розривів молекулярних зв'язків у живих клітинах. Саме тому взаємодія повільних електронів зі складними молекулами, в тому числі з молекулами амінокислот, викликає значний інтерес з точки зору відстеження перетворень у живих клітинах під дією іонізуючого випромінювання.

Це, безумовно, і визначає незаперечну актуальність даної дисертаційної роботи. Автором було поставлено та вирішено важливу задачу дослідження характеристик вказаних вище процесів зіткнення шляхом аналізу масового складу продуктів реакцій іонізації та дисоціативної іонізації складних

органічних молекул. Безпосередня реєстрація таких продуктів – позитивних іонів різної кратності у залежності від відношення їх маси до заряду – дозволила авторові визначити як їх маси, так і енергетичні характеристики їх утворення, зокрема, енергії іонізації та потенціали появи. Для вирішення поставлених завдань був використаний мас-спектрометричний метод з використанням техніки молекулярного та електронного пучків, що перетинаються під кутом 90° , для дослідження основних характеристик та закономірностей вказаних процесів з подальшою екстракцією продуктів взаємодії (іонів) під прямим кутом до площини перетину пучків.

У ході виконання роботи автором було суттєво модернізовану експериментальну установку на базі магнітного мас-спектрометра та проведено великий обсяг експериментальних досліджень. Ним особисто здійснено подальшу модернізацію мас-спектрометра, яка включила у себе адаптацію джерела іонів для роботи з порошкоподібними речовинами та удосконалення 3-х електродної гармати, а також розробку принципово нових існуючих функціональних модулів магнітного мас спектрометра – автоматизованої системи живлення функціональних блоків мас-спектрометра та їх керування, системи збору даних та реєстрації корисного сигналу, модуля розгортки мас-спектрів, систему стабілізації і контролю температури джерела молекулярного пучка.

У результаті виконання роботи отримано значний обсяг даних з виходу іонізованих продуктів взаємодії повільних електронів з молекулами амінокислот, зокрема:

- Проведено комплексні експериментальні дослідження мас-спектрів молекул амінокислот гліцину, метіоніну, триптофану та аланіну, ідентифіковано їх основні компоненти, та виміряно енергії іонізації вихідних молекул та потенціали (енергії) появи їх основних фрагментів.
- Проведено аналіз отриманих експериментальних результатів із використанням відповідних даних теоретичних розрахунків та встановлено основні механізми дисоціації вихідних молекул амінокислот.
- Встановлено основні канали фрагментації молекул амінокислот, виявлено найбільш ймовірні шляхи розриву зв'язків у вихідних молекулах під дією повільних електронів, відстежено зміну зарядів комплементарних фрагментів.
- Встановлено роль повільних електронів (енергією до 100 eV) у руйнуванні молекул амінокислот, основних складових молекул білків живих тканин організму людини, що є надзвичайно важливим компонентом радіаційної терапії злоякісних утворень у людському організмі.

Отримані у роботі результати мають беззаперечну новизну. Зокрема:

1. Вперше здійснено комплексні мас-спектрометричні дослідження фрагментації молекул гліцину, метіоніну, триптофану та аланіну. Ідентифіковано основні продукти їх розпаду під дією електронів, встановлено їх склад та зарядність.

2. Отримано енергетичні залежності перерізів іонізації та дисоціативної іонізації вказаних молекул амінокислот в інтервалі енергій електронів поблизу порогу процесу. Встановлено основні канали дисоціації молекул з утворенням іонів-фрагментів та детально досліджено порогову поведінку перерізів дисоціативної іонізації.
3. Вперше використовуючи іонізацію електронним ударом визначено потенціали утворення більшості іонних фрагментів досліджуваних молекул.
4. Вперше мас-спектрометричним методом виявлено вихід двозарядних іонів з молекули гліцину та метіоніну відповідно, утворення котрих є результатом дисоціації скелетного зв'язку двозарядних іонів вихідних молекул, та супроводжується видаленням відповідних нейтральних фрагментів.
5. Вперше, використовуючи отримані експериментальні результати та наявні теоретичні дані проведено порівняння процесів утворення іонних фрагментів однакового хімічного складу з молекул гліцину, триптофану, метіоніну, та аланіну.

Достовірність отриманих у роботі нових даних з характеристик вказаних вище процесів, їх новизна і наукова вагомість не викликають сумнівів. Це підтверджується багаточисельними дослідженнями, результати яких мають високу відтворюваність, а застосування сучасних методик виділення корисного сигналу, накопичення і обробки даних досліджень, широке залучення теоретичних методик і співставлення отриманих результатів з наявними у літературі (у тому числі у сучасних базах даних) дозволило встановити принципово нові закономірності перебігу процесів електрон-молекулярної взаємодії.

Дисертаційна робота О.В. Паппа, результати досліджень, отримані з залученням ретельно розроблених і надійно апробованих методик, представляють значний науковий інтерес і можуть знайти широке застосування у практиці – екології, фармакології, медицині, зокрема у променевій терапії. Результати дисертації можуть бути рекомендовані до використання у Київському національному університеті імені Т.Г. Шевченка (м. Київ), Національному медичному університеті імені О.О. Богомольця (м. Київ), Інституті фізики НАН України (м. Київ), Харківському національному університеті імені В.Н. Каразіна (м. Харків) та інших організаціях України.

Результати досліджень, виконаних у дисертаційній роботі О.В. Паппа, достатньо повно викладені у публікаціях у вигляді монографії, наукових статей у провідних вітчизняних та міжнародних наукових журналах, матеріалів низки міжнародних конференцій, що свідчить про їх широку і всебічну апробацію. Звертає на себе широка географія представлення роботи на наукових зібраннях у різних країнах. Автореферат і цитовані роботи автора повністю відповідають дисертації.

Разом з тим, до дисертаційної роботи можна висловити декілька зауважень.

1. Відсутність чіткого пояснення вибору об'єктів дослідження.
2. Відсутність в переліку умовних позначень ряду часто вживаних в тексті позначень з хімії.
3. Недостатньо повно описана мас-спектроскопічна методика: не наведено мас-спектри залишкових газів, хоча мас-спектрометр відкачувався з використанням масляних насосів і об'єктами досліджень були органічні сполуки; детально не описана методика визначення енергії появи іонних фрагментів при дисоціативній іонізації.
4. У дисертації експериментально виміряно мас-спектри усіх досліджуваних молекул практично при 1–2 енергіях іонізуючих електронів. Але робота значно виграла би, якби у ній порівнювалися мас-спектри, одержані при різних енергіях електронів.
5. У роботі зустрічаються деякі стилістичні огріхи та орфографічні помилки.

Вказані недоліки не зменшують цінності дисертації як завершеної науково-дослідної роботи, виконаної на високому науковому рівні, в якій використано новітню методику дослідження і одержано нові результати, що в сукупності дає вагомий внесок в розвиток фізики електрон-молекулярних зіткнень.

Вважаю, що дисертаційна робота Паппа Олександра Вікторовича "Мас-спектрометрія процесів іонізації та дисоціативної іонізації молекул амінокислот електронами" повністю відповідає вимогам "Порядку присудження наукових ступенів", затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року, які висуваються до кандидатських дисертацій, а її автор – заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка.

Офіційний опонент,
професор кафедри фізичної електроніки
факультету радіофізики, електроніки
та комп'ютерних систем
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка,
доктор фізико-математичних наук, професор



В.Я. Черняк

Підпис офіційного опонента Черняка В.Я. засвідчую

ПІДПИС ЗАСВІДЧУЮ
ВЧЕНИЙ СЕКРЕТАР НДЧ
КАРАУЛЬНА Н.В.
28.04.2019р.

