

Отзыв

на автореферат диссертации Поддубного Владимира Владимировича «Теоретическое описание диссипативной динамики первичного переноса электрона в реакционных центрах пурпурной бактерии *Rh. sphaeroides*», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Диссертационная работа, автореферат которой представлен на отзыв, посвящена актуальной проблеме – исследованию молекулярных механизмов быстрых (характерное время порядка нескольких пикосекунд) реакций переноса электрона, протекающих в мембранных пигмент-белковых макромолекулярных комплексах (фотосинтетических реакционных центрах) пурпурных бактерий на первичных стадиях процесса фотосинтеза.

Первая реакция процесса фотосинтетического разделения зарядов – перенос электрона с фотовозбужденного димера бактериохлорофилла (специальная пара) на мономер бактериохлорофилла характеризуется рядом интересных особенностей. Так, например, константа скорости этой реакции имеет аномальную температурную зависимость, увеличиваясь с понижением температуры. Другим примером является то, что в процессе реакции наблюдаются осцилляции заселенностей состояний с разделенными и неразделенными зарядами в системе кофакторов димер-мономер. Эти свойства являются предметом исследования уже длительный период времени, но многие тонкие детали молекулярных механизмов, определяющих эти свойства, до сих пор остаются дискуссионными.

Проведя большую и кропотливую работу по выбору адекватных методов компьютерного моделирования, основанных на применении методов вычислительной квантовой химии и комбинированных методов квантовой химии и молекулярной динамики, автору удалось найти подход, позволивший получить результаты, хорошо согласующиеся с имеющимися экспериментальными данными. Это заслуживает высокой оценки, так как в компьютерном моделировании сложных молекулярных систем при рассмотрении квантовых процессов выбор метода теоретического анализа является основной и наиболее трудной задачей.

С точки зрения полученных автором результатов наиболее важным является вывод о том, что наблюдаемые свойства данной реакции обусловлены динамикой всей молекулярной структуры РЦ. Другими словами, интегральная динамика белкового окружения кофакторов, отклик всей белковой матрицы в ответ на возникновение нового электронного состояния, определяет наблюдаемые особенности исследуемой в диссертации реакции. Это вывод является важным еще и по той причине, что при

исследовании подобных процессов зачастую поиск механизмов основан на парадигме так называемой «выделенной моды», когда «координата реакции» определяется динамикой некоторой, так или иначе, выделенной части системы. В данной работе обоснован вывод о том, что в организации подобных реакций участие принимает вся молекулярная система, что поддерживает интуитивные представления о роли и функциональной значимости макромолекулярных белковых структур в организации работы активного центра.

Автореферат и научные публикации автора позволяют сделать вывод, что данная работа является законченным научно-исследовательским трудом. Диссертационная работа выполнена на актуальную тему на высоком научном уровне, удовлетворяет требованиям и отвечает критериям, установленным в п. 2 "Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова", предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Поддубный В.В. заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук.

16 ноября 2017 г.

кандидат физико-математических наук
по специальности 03.00.02 – биофизика

Красильников П.М.

Название организации: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова» (МГУ имени М.В. Ломоносова)

Должность: доцент кафедры биофизики Биологического факультета

Адрес: 119992, г. Москва, Ленинские горы, д.1, стр. 24

Телефон (495) 939-43-67

Адрес электронной почты: Krasilnikov@biophys.msu.ru, krapam@mail.ru

