

Отзыв научного руководителя

на диссертационную работу аспиранта лаборатории квантовой фотодинамики кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова Кусочека Павла Александровича на тему «**Моделирование механизмов первичных фотохимических реакций и фотоиндуцированной динамики ретиналь-содержащих белков**» по специальности 1.4.4 – физическая химия по физико-математическим наукам.

Кусочек Павел Александрович с отличием окончил химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова в 2017 году. В этом же году он поступил в очную аспирантуру химического факультета и с 1-го года аспирантуры работает в лаборатории квантовой фотодинамики кафедры физической химии. За время обучения в аспирантуре с 2017 г. по 2021 г. Павел Александрович в полном объеме и своевременно выполнил индивидуальный план аспиранта, сдал экзамены кандидатского минимума, выполнил и успешно защитил научно-квалификационную работу «**Моделирование механизмов первичных фотохимических реакций ретиналь-содержащих белков**».

В ходе обучения в аспирантуре участвовал в проведении научных исследований, связанных с изучением роли белкового окружения в механизмах прямых и обратных реакций фотоизомеризации и фотоиндуцированной динамики на ранних временах протонированного основания Шиффа ретиналя в микробиальных родопсинах и белках зрительной рецепции. Тема диссертационной работы Кусочека П.А. является актуальной. Широкий интерес к исследованию фотохимических процессов, протекающих при электронно-колебательном возбуждении биологических хромофоров и фотоактивных белков, обусловлен их высокой эффективностью и сверхбыстрыми фемтосекундными временами протекания первичных фотоинициируемых реакций в белковом окружении. Помимо фундаментальной значимости данное исследование важно для прикладных задач в области оптогенетики, а также для создания сверхбыстрых оптических молекулярных переключателей и молекулярных моторов.

Кусочеком П.А. получен ряд новых и важных результатов. Впервые проведено исследование поверхности потенциальной энергии первого электронно-возбужденного состояния различных изомеров изолированной хромофорной группы ретиналь-содержащих белков и проведена оценка их средних времен жизни в возбужденном состоянии с помощью методов квантовой химии высокого уровня точности. Полученные результаты позволили провести интерпретацию экспериментальных данных по фемтосекундной спектроскопии с временным разрешением и свидетельствуют о наличии эффективных механизмов управления фотооткликом хромофорной группы в белковом окружении, которое способно менять как специфичность, так и значительно ускорять реакцию фотоизомеризации по сравнению с газовой фазой.

Проведенное Кусочеком П.А. моделирование электронно-колебательных спектров ретиналя в родопсинах первого и второго типа впервые позволило установить связь между структурой активного центра белков и активностью при фотовозбуждении тех колебательных мод, которые способствуют реакции фотоизомеризации в различном белковом окружении. Также установлена природа нереакционноспособных состояний

родопсинов, связанная со структурной гетерогенностью этих белков в основном электронном состоянии. Полученные результаты по механизмам и селективности прямых и обратных реакций фотоизомеризации как в газовой фазе, так и белковом окружении крайне важны для разработки оптических молекулярных переключателей на основе родопсинов и их хромофорной группы.

В 2019 году Кусочек П.А. получил грант РФФИ «Аспиранты» №19-33-90254 «Роль белкового окружения в механизме фотоизомеризации ретиналь-содержащих белков», он также участвовал в выполнении грантов РНФ и РФФИ. Результаты его научных исследований опубликованы в 9 печатных изданиях, в том числе 4 статьи опубликованы в международных рецензируемых изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus, RSCI, из них 3 статьи – в высокорейтинговых международных журналах. Результаты работы неоднократно представлялись им на конференциях российского и международного уровня (всего – 14 докладов). Его доклады на ежегодной международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» были отмечены как одни из лучших в 2018 и 2021 годах. Он также является победителем конкурса работ молодых ученых XXXVI Всероссийского Симпозиума молодых ученых по химической кинетике в 2019 году.

Кусочек П.А. является квалифицированным специалистом в области вычислительной квантовой химии, молекулярного моделирования и биофизики родопсинов. Он способен самостоятельно проводить научные исследования и творчески решать научные задачи.

Диссертационная работа Кусочка П.А. представляет собой целостное научное исследование, обладает научной новизной и практической значимостью. Она удовлетворяет требованиям пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Научный руководитель:

доцент кафедры физической химии химического факультета
ФГБОУ ВО «Московский государственный университет
имени М.В. Ломоносова», кандидат физико-математических наук
(специальность 02.00.17 – математическая и квантовая химия)

Боченкова Анастасия Владимировна
E-mail: bochenkova@phys.chem.msu.ru

17 мая 2022

