

Заключение диссертационного совета МГУ.02.02
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

Решение диссертационного совета от «23» ноября 2017 г. № 5

О присуждении Поддубному Владимиру Владимировичу гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Теоретическое описание диссипативной динамики первичного переноса электрона в реакционных центрах пурпурной бактерии *Rh. sphaeroides*» по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия принята к защите диссертационным советом 12 октября 2017 года, протокол № 2.

Соискатель Поддубный Владимир Владимирович 1991 года рождения в 2013 году окончил химический факультет Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», а 30 сентября 2017 года окончил аспирантуру химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

В настоящее время соискатель временно не работает.

Диссертация выполнена в лаборатории молекулярной спектроскопии кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук Еремин Вадим Владимирович, профессор кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Официальные оппоненты:

Новодережкин Владимир Ипполитович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник отдела фотосинтеза и флуоресцентных методов исследований Научно-исследовательского института физико-химической биологии имени А.Н. Белозерского ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Проскуряков Иван Игоревич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией молекулярной спектроскопии ФГБУН «Институт фундаментальных проблем биологии РАН»;

Пищальников Роман Юрьевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела волновых явлений лаборатории лазерной спектроскопии Научного центра волновых исследований ФГБУН «Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 12 опубликованных работ, все по теме диссертации, из них 7 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

1. Еремин В.В., Глебов И.О., Поддубный В.В. Роль когерентности в явлениях переноса электрона в природных биохимических наносистемах // Наносистемы: физика, химия, математика. — 2013. — Т. 4, № 1. — С. 130–138.
2. Поддубный В.В., Глебов И.О., Еремин В.В. Немарковская диссипативная динамика переноса электрона в реакционном центре фотосинтеза // ТМФ. — 2014. — Т. 178, № 2. — С. 295–304.
3. Поддубный В.В., Глебов И.О., Сударькова С.М. Применимость приближения равновесности белкового окружения при описании сверхбыстрых биофизических процессов // ТМФ. — 2015. — Т. 183, № 3. — С. 498–512.
4. Glebov I.O., Poddubnyy V.V., Eremin V.V. Evidence for the purely electronic character of primary electron transfer in purple bacteria Rh. Sphaeroides // Mol. Phys. — 2015. — V. 113, No 21. — P. 3196–3201.
5. Kozlov M.I., Poddubnyy V.V., Glebov I.O., Belov A.S., Khokhlov D.V. Ab initio calculation of excitonic hamiltonian of light-harvesting complex LH1 of Thermochromatium tepidum // Chem. Phys. Lett. — 2015. — V. 645. — P. 48–52.
6. Белов А.С., Хохлов Д.В., Поддубный В.В. Сравнение точности приближенных методов TrESP и TrCAMM для расчета энергии взаимодействия между пигментами фотосинтетических комплексов // ДАН. — 2016. — Т. 468, № 1. — С. 48–51.
7. Belov A.S., Khokhlov D.V., Glebov I.O., Poddubnyy V.V., Eremin V.V. Stability and properties of quasi-stable conformational states in the LH2 light-harvesting complex of

Rbl. acidophilus bacteria formed by hexacoordination of bacteriochlorophyll a magnesium atom // Chem. Phys. — 2017. — V. 490. — P. 81–91.

На диссертацию и автореферат поступило 2 отзыва, все отзывы положительные.

Выбор официальных оппонентов обосновывался тем, что они являются авторитетными специалистами в области изучения первичных фотосинтетических процессов и переноса электрона в реакционных центрах и имеют публикации в ведущих научных изданиях по вопросам, близким к проблематике диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена задача квантово-химического моделирования динамики первичного переноса электрона в фотосинтетических реакционных центрах бактерии *Rh. sphaeroides*, имеющая значение для развития исследований сверхбыстрых процессов в белковых системах.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Предложен новый метод расчета диссипативной динамики, с помощью которого возможен учет неравновесности термостата;
2. С использованием предложенного соискателем метода впервые проведен неэмпирический расчет параметров диссипативной динамики переноса электрона в фотосинтетическом реакционном центре бактерии *Rh. sphaeroides*;
3. Показано, что возбуждение колебаний белкового окружения приводит к появлению дополнительно вклада в скорость переноса электрона, а также к проявлению осцилляций в фемтосекундных зависимостях спектральных свойств реакционного центра.

На заседании 23 ноября 2017 г. диссертационный совет принял решение присудить Поддубному Владимиру Владимировичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 6 докторов наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за - 18, против - 1, недействительных бюллетеней - 0.

23.11.2017 г.

Председатель диссертационного совета,
д.х.н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета,
к.х.н.

Немухин А.В.



Матушкина Н.Н.