

ОТЗЫВ НАУЧНОГО КОНСУЛЬТАНТА

о работе Рязанцева Михаила Николаевича

по докторской диссертации «Разработка вычислительных моделей и методов для рационального дизайна фотоактивируемых молекулярных систем на основе низкомолекулярных соединений и белковых молекул»

02.00.09 - Химия высоких энергий

Диссертация Рязанцева М.Н. «Разработка вычислительных моделей и методов для рационального дизайна фотоактивируемых молекулярных систем на основе низкомолекулярных соединений и белковых молекул» посвящена актуальной проблеме разработки новых моделей и методов компьютерного дизайна фотоактивируемых молекулярных систем на основе органических и биологических молекул.

В результате диссертационных исследований Рязанцева М.Н. была предложена общая методика моделирования оптических свойств фоточувствительных белков из семейства родопсинов на основе их аминокислотной последовательности. Разработана новая квантовомеханическая модель фотоизомеризации зрительного родопсина. В работе был использован новый биомиметический подход к рациональному дизайну фотоактивируемых органических соединений, имитирующих свойства фоточувствительных белков родопсинов. В результате проведенных исследований предложен ряд биомиметических фотоактивируемых соединений с уникальными фотохимическими свойствами. Полученные соединения изучены с использованием спектроскопии высокого временного разрешения.

В работе также были предложены новые алгоритмы для усовершенствования существующих методов для моделирования термических химических реакций, что позволило проводить автоматический поиск переходных состояний для молекулярных систем среднего и большого размера. Предложены принципиально новые алгоритмы автоматического моделирования фотохимических реакций от Франк-Кондоновской точки до продуктов. Проведено тестирование предложенных методов автоматического

моделирования на ряде термических и фотохимических реакций.

Разработанные в ходе диссертационной работы Рязанцева М.Н. методы и подходы могут быть использованы для решения широкого класса прикладных и фундаментальных задач, требующих моделирования как термических, так и фотохимических реакций.

Диссертационная работа Рязанцева Михаила Николаевича является законченным исследованием, проводившемся в течение 2008 - 2020 годов. Публикации в периодических изданиях, входящих в перечень ВАК и международные индексы цитирования (Web of Science и SCOPUS), а также доклады результатов на международных конференциях удовлетворяют требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям. Вышеизложенное позволяет считать Рязанцева М.Н. достойным присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.09 - Химия высоких энергий.

Научный консультант,
заведующий кафедрой
лазерной химии и лазерного
материаловедения Института
Химии СПбГУ, д.х.н.,
профессор

24.08.2020



Тверьянович
Юрий
Станиславович