

## Сведения об официальных оппонентах

по диссертации *Кусочка Павла Александровича.*

*«Моделирование механизмов первичных фотохимических реакций и фотоиндуцированной динамики ретиналь-содержащих белков»*

**Ф.И.О.:** Цирельсон Владимир Григорьевич

**Ученая степень:** доктор физико-математических наук

**Ученое звание:** профессор

**Научная(ые) специальность(и):** 01.04.17, Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

**Должность:** заведующий кафедрой квантовой химии Российского химико-технологического университета имени Д.И.Менделеева

**Место работы:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева", кафедра квантовой химии

**Адрес места работы:** 125047, г.Москва, Миусская площадь, д.9

**Тел.:** +7 (499) 978-95-84

**E-mail:** tsirelson.v.g@muctr.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. Levina E.O., Khrenova M.G., Astakhov A.A., **Tsirelson V.G.** Keto-enol tautomerism from the electron delocalization perspective // *J. Comput. Chem.* — 2022. — Vol. 43, № 15. — P. 1000–1010.
2. **Tsirelson V.G.**, Stash A. Developing orbital-free quantum crystallography: the local potentials and associated partial charge densities // *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* — 2021. — Vol. 77, № 4. — P. 467–477.
3. Bartashevich E., Stash A., Yushina I., Minyaev M., Bol'shakov O., Rakitin O., **Tsirelson V.G.** Bonding features in Appel's salt from the orbital-free quantum crystallographic perspective // *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* — 2021. — Vol. 77, № 4. — P. 478–487.
4. Levina E.O., Khrenova M.G., **Tsirelson V.G.** The explicit role of electron exchange in the hydrogen bonded molecular complexes // *J. Comput. Chem.* — 2021. — Vol. 42, № 12. — P. 870–882.

5. Shteingolts S.A., Stash A.I., **Tsirelson V.G.**, Fayzullin R.R. Orbital-Free Quantum Crystallographic View on Noncovalent Bonding: Insights into Hydrogen Bonds,  $\pi\cdots\pi$  and Reverse Electron Lone Pair $\cdots\pi$  Interactions // *Chem. – A Eur. J.* — 2021. — Vol. 27, № 28. — P. 7789–7809.
6. Khrenova M.G., Levina E.O., **Tsirelson V.G.** Benchmark studies of hydrogen bond governing reactivity of cephalosporins in L1 metallo- $\beta$ -lactamase: Efficient and reliable QSPR equations // *Int. J. Quantum Chem.* — 2021. — Vol. 121, № 4. — P. 1–12.
7. Khrenova M.G., Nemukhin A. V., **Tsirelson V.G.** Discrimination of enzyme–substrate complexes by reactivity using the electron density analysis: peptide bond hydrolysis by the matrix metalloproteinase-2 // *Mendeleev Commun.* — 2020. — Vol. 30, № 5. — P. 583–585.
8. Khrenova M.G., **Tsirelson V.G.**, Nemukhin A. V. Dynamical properties of enzyme–substrate complexes disclose substrate specificity of the SARS-CoV-2 main protease as characterized by the electron density descriptors // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 2020. — Vol. 22, № 34. — P. 19069–19079.
9. Bartashevich E., Sobalev S., Matveychuk Y., **Tsirelson V.G.** Variations of quantum electronic pressure under the external compression in crystals with halogen bonds assembled in  $\text{Cl}_3^-$ ,  $\text{Br}_3^-$ ,  $\text{I}_3^-$ -synthons // *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* — 2020. — Vol. 76, № 4. — P. 514–523.
10. Levina E.O., Khrenova M.G., Astakhov A.A., **Tsirelson V.G.** Revealing electronic features governing hydrolysis of cephalosporins in the active site of the L1 metallo- $\beta$ -lactamase // *RSC Adv.* — 2020. — Vol. 10, № 15. — P. 8664–8676.
11. Bartashevich E. V., Matveychuk Y. V., Mukhitdinova S.E., Sobalev S.A., Khrenova M.G., **Tsirelson V.G.** The common trends for the halogen, chalcogen, and pnictogen bonds via sorting principles and local bonding properties // *Theor. Chem. Acc.* — 2020. — Vol. 139, № 2. — P. 26.
12. **Tsirelson V.G.**, Stash A.I., Tokatly I. V. Quantum pressure focusing in solids: a reconstruction from experimental electron density // *Acta Crystallogr. Sect. B Struct. Sci. Cryst. Eng. Mater.* — 2019. — Vol. 75, № 2. — P. 201–209.
13. Khrenova M.G., **Tsirelson V.G.** The  $\text{N}\cdots\text{H}$  hydrogen bond strength in the transition state at the limiting step determines the reactivity of cephalosporins in the active site of L1 metallo- $\beta$ -lactamase // *Mendeleev Commun.* — 2019. — Vol. 29, № 5. — P. 492–494.
14. Khrenova M.G., Krivitskaya A. V., **Tsirelson V.G.** The QM/MM-QTAIM approach reveals the nature of the different reactivity of cephalosporins in the active site of L1 metallo- $\beta$ -lactamase // *New J. Chem.* — 2019. — Vol. 43, № 19. — P. 7329–7338.

15. Khrenova M.G., Nemukhin A. V., **Tsirelson V.G.** Origin of the  $\pi$ -stacking induced shifts in absorption spectral bands of the green fluorescent protein chromophore // Chem. Phys. — 2019. — Vol. 522. — P. 32–38.

**Ф.И.О.:** Черепанов Дмитрий Александрович

**Ученая степень:** доктор физико-математических наук

**Ученое звание:** нет

**Научная(ые) специальность(и):** 03.01.02 – Биофизика (физ.-мат. науки)

**Должность:** ведущий научный сотрудник лаборатории нанофотоники Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии Наук

**Место работы:** Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской Академии Наук

**Адрес места работы:** 119991, г.Москва, ул. Косыгина, 4

**Тел.:** +7 (495) 939-73-47

**E-mail:** fs@chph.ras.ru

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. Smitienko O.A., Feldman T.B., Petrovskaya L.E., Nekrasova O. V., Yakovleva M.A., Shelaev I. V., Gostev F.E., **Cherepanov D.A.**, Kolchugina I.B., Dolgikh D.A., Nadtochenko V.A., Kirpichnikov M.P., Ostrovsky M.A. Comparative Femtosecond Spectroscopy of Primary Photoreactions of Exiguobacterium sibiricum Rhodopsin and Halobacterium salinarum Bacteriorhodopsin // J. Phys. Chem. B. — 2021. — Vol. 125, № 4. — P. 995–1008.

2. Kurashov V., Milanovsky G., Luo L., Martin A., Semenov A.Y., Savikhin S., **Cherepanov D.A.**, Golbeck J.H., Xu W. Conserved residue PsaB-Trp673 is essential for high-efficiency electron transfer between the phyloquinones and the iron-sulfur clusters in Photosystem I // Photosynth. Res. — 2021. — Vol. 148, № 3. — P. 161–180.

3. **Cherepanov D.A.**, Shelaev I. V., Gostev F.E., Petrova A., Aybush A. V., Nadochenko V.A., Xu W., Golbeck J.H., Semenov A.Y. Primary charge separation within the structurally symmetric tetrameric Chl2APAPBChl2B chlorophyll exciplex in photosystem I // *J. Photochem. Photobiol. B Biol.* — 2021. — Vol. 217. — P. 112154.
4. Yaroshevich I.A., Maksimov E.G., Sluchanko N.N., Zlenko D. V., Stepanov A. V., Slutskaia E.A., Slonimskiy Y.B., Botnarevskii V.S., Remeeva A., Gushchin I., Kovalev K., Gordeliy V.I., Shelaev I. V., Gostev F.E., Khakhulin D., Poddubnyy V. V., Gostev T.S., **Cherepanov D.A.**, Polivka T., et al. Role of hydrogen bond alternation and charge transfer states in photoactivation of the Orange Carotenoid Protein // *Commun. Biol.* — 2021. — Vol. 4, № 1. — P. 539.
5. **Cherepanov D.A.**, Shelaev I. V., Gostev F.E., Nadochenko V.A., Xu W., Golbeck J.H., Semenov A.Y. Symmetry breaking in photosystem I: ultrafast optical studies of variants near the accessory chlorophylls in the A- and B-branches of electron transfer cofactors // *Photochem. Photobiol. Sci.* — 2021. — Vol. 20, № 9. — P. 1209–1227.
6. Gorka M., **Cherepanov D.A.**, Semenov A.Y., Golbeck J.H. Control of electron transfer by protein dynamics in photosynthetic reaction centers // *Crit. Rev. Biochem. Mol. Biol.* — 2020. — Vol. 55, № 5. — P. 425–468.
7. **Cherepanov D.A.**, Shelaev I. V., Gostev F.E., Aybush A. V., Mamedov M.D., Shen G., Nadochenko V.A., Bryant D.A., Semenov A.Y., Golbeck J.H. Evidence that chlorophyll f functions solely as an antenna pigment in far-red-light photosystem I from *Fischerella thermalis* PCC 7521 // *Biochim. Biophys. Acta - Bioenerg.* — 2020. — Vol. 1861, № 5–6. — P. 148184.
8. **Cherepanov D.A.**, Shelaev I. V., Gostev F.E., Aybush A. V., Mamedov M.D., Shuvalov V.A., Semenov A.Y., Nadochenko V.A. Generation of ion-radical chlorophyll states in the light-harvesting antenna and the reaction center of cyanobacterial photosystem I // *Photosynth. Res.* — 2020. — Vol. 146, № 1–3. — P. 55–73.
9. **Cherepanov D.A.**, Brady N.G., Shelaev I. V., Nguyen J., Gostev F.E., Mamedov M.D., Nadochenko V.A., Bruce B.D. PSI-SMALP, a Detergent-free Cyanobacterial Photosystem I, Reveals Faster Femtosecond Photochemistry // *Biophys. J.* — 2020. — Vol. 118, № 2. — P. 337–351.
10. Shalaeva D.N., **Cherepanov D.A.**, Galperin M.Y., Vriend G., Mulkidjanian A.Y. G protein-coupled receptors of class A harness the energy of membrane potential to increase their sensitivity and selectivity // *Biochim. Biophys. Acta - Biomembr.* — 2019. — Vol. 1861, № 12. — P. 183051.

11. Milanovsky G., Gopta O., Petrova A., Mamedov M., Gorka M., **Cherepanov D.A.**, Golbeck J.H., Semenov A. Multiple pathways of charge recombination revealed by the temperature dependence of electron transfer kinetics in cyanobacterial photosystem I // *Biochim. Biophys. Acta - Bioenerg.* — 2019. — Vol. 1860, № 8. — P. 601–610.
12. Bozdaganyan M.E., Lokhmatikov A. V., Voskoboynikova N., **Cherepanov D.A.**, Steinhoff H.-J., Shaitan K. V., Mulkidjanian A.Y. Proton leakage across lipid bilayers: Oxygen atoms of phospholipid ester linkers align water molecules into transmembrane water wires // *Biochim. Biophys. Acta - Bioenerg.* — 2019. — Vol. 1860, № 6. — P. 439–451.
13. Kurashov V., Gorka M., Milanovsky G.E., Johnson T.W., **Cherepanov D.A.**, Semenov A.Y., Golbeck J.H. Critical evaluation of electron transfer kinetics in P700–FA/FB, P700–FX, and P700–A1 Photosystem I core complexes in liquid and in trehalose glass // *Biochim. Biophys. Acta - Bioenerg.* — 2018. — Vol. 1859, № 12. — P. 1288–1301.
14. **Cherepanov D.A.**, Milanovsky G.E., Gopta O.A., Balasubramanian R., Bryant D.A., Semenov A.Y., Golbeck J.H. Electron–Phonon Coupling in Cyanobacterial Photosystem I // *J. Phys. Chem. B.* — 2018. — Vol. 122, № 33. — P. 7943–7955.
15. **Cherepanov D.A.**, Gostev F.E., Shelaev I. V., Denisov N.N., Nadtochenko V.A. Monitoring the electric field in CdSe quantum dots under ultrafast interfacial electron transfer via coherent phonon dynamics // *Nanoscale.* — 2018. — Vol. 10, № 47. — P. 22409–22419.

**Ф.И.О.:** Фельдман Татьяна Борисовна

**Ученая степень:** доктор биологических наук

**Ученое звание:** нет

**Научная(ые) специальность(и):** 03.01.02, Биофизика

**Должность:** ведущий научный сотрудник кафедры молекулярной физиологии биологического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова

**Место работы:** Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», биологический факультет, кафедра молекулярной физиологии

**Адрес места работы:** 119991, Москва, ГСП-1, Ленинские горы, д.1, стр.12, биологический факультет

**Тел.:**84959393302

Список основных научных публикаций по специальности 1.4.4 – Физическая химия за последние 5 лет:

1. Yakovleva M.A., Radchenko A.S., Kostyukov A.A., Chagovets V. V., Kononikhin A.S., Khubetsova M.K., Borzenok S.A., Kuzmin V.A., Nikolaev E.N., **Feldman T.B.**, Ostrovsky M.A. Comparative Analysis of the Physicochemical Characteristics of Fluorophore Groups of Lipofuscin Granules from Cells of Retinal Pigmental Epithelium of Human Cadaver Eyes in the Norm and in a Pathology // *Russ. J. Phys. Chem. B.* — 2022. — Vol. 16, № 1. — P. 90–96.
2. Yakovleva M.A., **Feldman T.B.**, Lyakhova K.N., Utina D.M., Kolesnikova I.A., Vinogradova Y. V., Molokanov A.G., Ostrovsky M.A. Ionized Radiation-Mediated Retinoid Oxidation in the Retina and Retinal Pigment Epithelium of the Murine Eye // *Radiat. Res.* — 2021. — Vol. 197, № 3. — P. 270-279.
3. Yakovleva M., Dontsov A., Trofimova N., Sakina N., Kononikhin A., Aybush A., Gulin A., **Feldman T.B.**, Ostrovsky M. Lipofuscin Granule Bisretinoid Oxidation in the Human Retinal Pigment Epithelium forms Cytotoxic Carbonyls // *Int. J. Mol. Sci.* — 2021. — Vol. 23, № 1. — P. 222.
4. Dontsov A., Yakovleva M., Trofimova N., Sakina N., Gulin A., Aybush A., Gostev F., Vasin A., **Feldman T.B.**, Ostrovsky M. Water-Soluble Products of Photooxidative Destruction of the Bisretinoid A2E Cause Proteins Modification in the Dark // *Int. J. Mol. Sci.* — 2022. — Vol. 23, № 3. — P. 1534.
5. Smitienko O.A., **Feldman T.B.**, Petrovskaya L.E., Nekrasova O. V., Yakovleva M.A., Shelaev I. V., Gostev F.E., Cherepanov D.A., Kolchugina I.B., Dolgikh D.A., Nadtochenko V.A., Kirpichnikov M.P., Ostrovsky M.A. Comparative Femtosecond Spectroscopy of Primary Photoreactions of *Exiguobacterium sibiricum* Rhodopsin and *Halobacterium salinarum* Bacteriorhodopsin // *J. Phys. Chem. B.* — 2021. — Vol. 125, № 4. — P. 995–1008.

6. **Feldman T.B.**, Yakovleva M., Viljanen M., Lindström M., Donner K., Ostrovsky M. Dark-adaptation in the eyes of a lake and a sea population of opossum shrimp (*Mysis relicta*): retinoid isomer dynamics, rhodopsin regeneration, and recovery of light sensitivity // *J. Comp. Physiol. A.* — 2020. — Vol. 206, № 6. — P. 871–889.
7. Yakovleva M.A., Radchenko A.S., **Feldman T.B.**, Kostyukov A.A., Arbukhanova P.M., Borzenok S.A., Kuzmin V.A., Ostrovsky M.A. Fluorescence characteristics of lipofuscin fluorophores from human retinal pigment epithelium // *Photochem. Photobiol. Sci.* — 2020. — Vol. 19, № 7. — P. 920–930.
8. Dontsov A.E., Sakina N.L., Yakovleva M.A., Bastrakov A.I., Bastrakova I.G., Zagorinsky A.A., Ushakova N.A., **Feldman T.B.**, Ostrovsky M.A. Ommochromes from the Compound Eyes of Insects: Physicochemical Properties and Antioxidant Activity // *Biochem.* — 2020. — Vol. 85, № 6. — P. 668–678.
9. Shigaev A.S., **Feldman T.B.**, Nadtochenko V.A., Ostrovsky M.A., Lakhno V.D. Quantum-classical model of the rhodopsin retinal chromophore cis–trans photoisomerization with modified inter-subsystem coupling // *Comput. Theor. Chem.* — 2020. — Vol. 1181. — P. 112831.
10. Yakovleva M.A., Radchenko A.S., Kostyukov A.A., Arbukhanova P.M., Borzenok S.A., Kuzmin V.A., **Feldman T.B.**, Ostrovsky M.A. Reconstruction of the Fluorescence Spectra of Bisretinoids and the Products of Their Photooxidation and Photodegradation from the Retinal Pigment Epithelium of the Human Eye // *Russ. J. Phys. Chem. B.* — 2020. — Vol. 14, № 3. — P. 462–467.
11. Медведева А.С., Смитиенко О.А., **Фельдман Т.Б.**, Островский М.А. сравнительное исследование фотохимии микробимальных родопсинов (I типа) и родопсинов животных (II типа) // *Журнал эволюционной биохимии и физиологии.* — 2020. — Vol. 56, № 7. — P. 519–523.
12. **Feldman T.B.**, Ivankov O.I., Kuklin A.I., Murugova T.N., Yakovleva M.A., Smitienko O.A., Kolchugina I.B., Round A., Gordeliy V.I., Belushkin A. V., Ostrovsky M.A. Small-angle neutron and X-ray scattering analysis of the supramolecular organization of rhodopsin in photoreceptor membrane // *Biochim. Biophys. Acta - Biomembr.* — 2019. — Vol. 1861, № 10. — P. 183000.
13. Yakovleva M.A., Lyakhova K.N., Utina D.M., Vinogradova U. V., Kolesnikova I.A., **Feldman T.B.**, Ostrovsky M.A. Changes in the Composition and Fluorescent Properties of Bisretinoids in the Retina and the Retinal Pigment Epithelium of the Mouse Eye under Exposure to Ionizing Radiation // *Biol. Bull.* — 2019. — Vol. 46, № 12. — P. 1641–1645.

14. Shigaev A.S., **Feldman T.B.**, Nadtochenko V.A., Ostrovsky M.A., Lakhno V.D. Investigation of Rhodopsin Chromophore Photoisomerization Based on the Quantum-Classical Model // Math. Biol. Bioinforma. — 2018. — Vol. 13, № 1. — P. 169–186.

15. **Feldman T.B.**, Yakovleva M.A., Larichev A. V., Arbukhanova P.M., Radchenko A.S., Borzenok S.A., Kuzmin V.A., Ostrovsky M.A. Spectral analysis of fundus autofluorescence pattern as a tool to detect early stages of degeneration in the retina and retinal pigment epithelium // Eye. — 2018. — Vol. 32, № 9. — P. 1440–1448.

Ученый секретарь диссертационного совета МГУ.014.3(МГУ/02.04)

кандидат химических наук, доцент

