

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Козлова Максима Игоревича на тему
«Влияние электронно-колебательного взаимодействия на перенос энергии в
светопоглощающем комплексе LHСII высших растений», представленный на соискание
ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 — физическая химия.

Диссертационная работа Козлова Максима Игоревича посвящена созданию модели для высокоточного описания электронно-колебательных состояний как отдельных хромофоров, так и всего комплекса LHСII с последующим изучением с помощью предложенной модели нефотохимического тушения флуоресценции в комплексе LHСII. Актуальность исследования обусловлена выбором объекта - светопоглощающего комплекса LHСII, который запускает процесс фотосинтеза в разнообразных живых организмах.

Работа выполнена на высоком теоретическом уровне, в автореферате подробно и структурировано представлено описание основных этапов работы и выполнен критически анализ полученных результатов.

К тексту автореферата имеются следующие замечания:

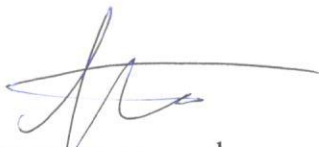
1) в схеме расчета зарядов и мультиполей не до конца прозрачна процедура расчетов параметров одночастичных свойств на уровне ХМСQDPT2. Также авторы упоминают схему, аналогичную зарядовой схеме Малликена о разбиении вкладов, относящихся к разным фрагментам; хотя известно, что даже модификация разбиения по Левдину дает более физические результаты.

2) при расчете формы линии колебательно-вращательных спектров автор не обсуждает различные существующие подходы к этой задаче, оставаясь по сути только в рамках достаточно простых приближений, не обсуждая альтернативные подходы.

Несмотря на указанные выше замечания, диссертационная работа выполнена на весьма высоком уровне. Решение поставленной в ней задачи является достаточно полным, работа является актуальной и обладает высокой научной значимостью и новизной.

Диссертация, представленная Козловым Максимом Игоревичем, соответствует критериям, определенным в пп. 2.1-2.5 «Положение о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете им. М.В. Ломоносова». Нет никаких сомнений, что автор работы является квалифицированным специалистом в области физической химии и молекулярного моделирования сложных биологических систем, и достоин ученой степени кандидата химических наук.

Безруков Дмитрий Сергеевич



22.12.2021

доцент кафедры физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», кандидат физико-математических наук

Контактные данные:

тел:

нет

e-mail:

dsbezrukov@gmail.com

Адрес места работы:

119991, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3

