

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу **Серденко Таїсії Володимирівни «Фотоіндуковані зміни інтегральних показників структури реакційних центрів бактерій *Rhodobacter sphaeroides* при переносі електрона»,** представленої на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 03.00.02 – біофізики.

Актуальність теми. Дисертаційна робота Серденко Т.В. присвячена дослідженню особливостей кінетики циклічного переносу електрона в реакційних центрах *Rhodobacter sphaeroides*.

Однією з важливих проблем сучасної біофізики є вивчення міжмолекулярних взаємодій у водному оточенні, тому вивчення процесів фотоіндукованого переносу електрону є важливим, адже цей процес вирішальним чином залежить від білок-пігментних взаємодій (A. A. Zabelin et.al. Effect of Leucine M196 Substitution by Histidine on Electronic Structure of the Primary Electron Donor and Electron Transfer in Reaction Centers from *Rhodobacter sphaeroides* // Biokhimiya, 2019, Vol. 84, No. 5, pp. 682-691).

З огляду на вищевказане, **актуальність дисертаційної роботи** Серденко Т.В., присвяченої дослідженню особливостей кінетики циклічного переносу електрона в реакційних центрах *Rhodobacter sphaeroides* не викликає сумнівів.

Ступінь обґрунтованості наукових положень та висновків, які сформульовані у дисертації, їх достовірність і новизна. Дисертаційна робота включає вступ, 4 розділи, загальні висновки та список використаної літератури, який включає 135 джерел, та додаток на 8 сторінках. Робота ілюстрована 10 таблицями та 44 рисунками.

У вступі автор аргументує актуальність проведених досліджень, чітко і науково грамотно формулює загальну мету і конкретні завдання досліджень.

Огляд літератури (розділ 1) містить аналіз сучасного стану розвитку наукових знань за напрямком дисертаційної роботи. Розділ написаний у логічній послідовності: висвітлено важливу роль факторів та умов, що впливають на ефективність переносу електрона, а також розглянуто існуючі математичні моделі переносу електрона в реакційних центрах (РЦ). Дисерантка наводить дані літератури про структуру та спектри РЦ.

У розділі «Матеріали і методи дослідження» дисерантка детально описує об'єкт дослідження та умови проведення експерименту. Для досягнення поставленої мети дисерантка коректно використовує протокол

подвійної експозиції для запису аборбційних спектрів РЦ, який дозволив авторці виконати поставлені завдання.

Представлені експериментальні результати (розділ 3) логічно пов'язані з метою і поставленими задачами. Наукові положення та висновки добре сформульовані та обґрунтовані і відображають отримані результати. Авторкою встановлено достатню кількість нових фактів, важливих для розвитку сучасних уявлень про характер переносу електрона РЦ. Проведений аналіз мультиекспоненціального характеру переносу електрона РЦ, який відповідає двом моделям кінетики переносу електрона при фотозбудженні РЦ.

Дисертанткою обґрунтовано доцільність застосування кінетичної моделі з чотирма станами (стан 0 відповідає перебуванню електрона на донорі, стани 1, 2 та 3 – перебуванню електрона на акцепторі РЦ), а також вперше встановлено ефективність її використання для пояснення кінетики фотоіндукованого переносу електрону в РЦ.

В розділі 4 проведено аналіз редокс-конформаційних станів білкового комплексу РЦ для різних інтенсивностей збуджуючого світла. Одержані результати дозволяють пояснити прискорення відновлення донора при освітленні та сповільнення відновлення після вимкнення збуджуючого світла. Під час цього РЦ знаходиться у нерівноважному стані при фотозбудженні та на першому етапі процесу релаксації. Показано, що кінетика ймовірності станів РЦ у процесі фотозбудження та релаксації має виражені екстремуми, що зумовлені ефектами структурної саморегуляції основної реакції (переносу електрона) у результаті просторових рухів макромолекули РЦ.

Результати досліджень викладені з належною повнотою, ілюстровані достатньою кількістю рисунків, графіків та таблиць, що суттєво полегшує сприймання матеріалу і проведення наукової експертизи. Отимані дані оброблені статистичними методами, і їх достовірність не викликає сумніву.

Сформульовані висновки є цілком правомірними та логічно обґрунтованими, а отримані результати необхідно розцінювати як нові і пріоритетні.

Отже, ступінь обґрунтованості наукових положень і висновків, наведених у дисертації Серденко Т.В., є високим. Це свідчить про те, що дисертантка є високо-кваліфікованою дослідницею, яка вміє критично аналізувати наукові факти і коректно інтерпретувати отримані результати.

Зауваження до дисертаційної роботи. Представлена до захисту дисертаційна робота Серденко Т.В. містить низку нових і важливих

результатів. Позитивно оцінюючи матеріал дисертації в цілому, в опонента при аналізі цієї роботи виникли такі зауваження і побажання:

- 1) на сторінці 46 опечатка в формулі - для кінетичної енергії електрона має бути L^2 а не L^3 ;
- 2) не до кінця зрозумілою є доцільність використання алгоритму власної розробки (градієнтного алгоритму) для задачі апроксимації експериментальних даних сумою експонент, бо для цієї задачі вже існують алгоритми з доведеними властивостями збіжності: алгоритм Канга (S.Y. Kung, A new identification and model reduction algorithm via singular value decomposition, Proc. 12th Asilomar Conf. Circuits, Syst. Computer, Pacific Grove, CA, 1978, pp. 705-715, P. DE GROEN, B. DE MOOR The fit of a sum of exponentials to noisy data // Journal of Computational and Applied Mathematics 20 (1987) p.175-187), що використовує сингулярне представлення матриці для матриць Хенкеля, та більш сучасний алгоритм, заснований на інтегральних рівняннях (Jean Jacquelain Regressions and integral equations.(2009), p.16–17. 2009);
- 3) в роботі використана рівноважна спектроскопія поглинання, але існують роботи, де одночасно використовують надшвидку фемтосекундну нестационарну спектроскопію поглинання разом з світлоіндукованою різницевою ІЧ- Фур'є спектроскопією, то чи не надають ці інші методики інформацію про коливання білкового оточення, до якого фотоіндукований перенос електрону в РЦ є вельми чутливим?
- 4) В літературі представлені розрахунки методами ab-initio молекулярної динаміки, які передбачають когерентні коливні рухи, що модулюють бар'єр для реакції фотоіндукованого розділення зарядів, та описують зміну в структурі до та після фотоіндукованого перенесення заряду: після збудження оборотня конформаційна перебудова стабілізує передачу заряду від P_L до P_M , задіючи обертання HisM202 з характеристичною частотою 100 см^{-1} , завдяки такому обертанню протон зміщується у водневій гратці водного оточення з частотою $30-35 \text{ см}^{-1}$. Потім через тривалий час інший протон змішується з $3^1\text{-ацетил } P_L$ в напрямку HisL168, що дестабілізує катіон P^+ , який переходить в нейтральний стан P^- , що суттєво зменшує силу, що діє в бік рекомбінації зарядів, як було запропоновано Deshmukh та співавторами (Deshmukh, S. S.; Akhavein, H.; Williams, J. C.; Allen, J. P.; KalAlmaAn, L. Light-Induced Conformational Changes in Photosynthetic Reaction Centers: Impact of Detergents and Lipids on the Electronic Structure of the Primary Electron Donor. Biochemistry 2011, 50, 5249-5262). Очевидно, подібні дуже детальні передбачення структурних змін потребують

- підтвердження, але залишається питання, чи узгоджуються такі передбачення з запропонованою дисеранткою кінетичною моделлю?
- 5) Як відомо, РЦ *Rhodobacter sphaeroides* мають два типи антен LH1 (light-harvesting complexes) та LH2 (G. McDermott, S. M. Prince, A. A. Freer, A. M. Hawthorntwaite-Lawless, M. Z. Papiz, R. J. Cogdell and N. W. Isaacs. Crystal structure of an integral membrane light-harvesting complex from photosynthetic bacteria. *Nature* 374.6522 (1995), pp. 517–521), але в роботі про такий поділ не згадується.
 - 6) Існують моделі, що передбачають утворення двократно відновленого убіхіону Q²⁻ (P. McPherson, M. Okamura and G. Feher. Electron transfer from the reaction center of *Rb. sphaeroides* to the quinone pool: Doubly reduced QB leaves the reaction center. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Bioenergetics* 1016.2 (1990), pp. 289–292), але авторка не згадує про них.

Зазначені зауваження носять доброзичливо-дискусійний характер, не впливають суттєво на оцінку результатів, наведених у роботі, і не знижують наукового рівня та цінності дисертаційної роботи, а спрямовані лише на покращення спрямованості подальших досліджень.

Відповідність дисертації встановленим вимогам. Дисертаційна робота Серденко Т.В. «Фотоіндуковані зміни інтегральних показників структури реакційних центрів бактерій *Rhodobacter sphaeroides* при переносі електрона» має завершений характер і відповідає чинним вимогам до кандидатських дисертацій. Експериментальні дані проаналізовані і статистично опрацьовані. Наукові положення, висновки та рекомендації обґрунтовані і логічно випливають з отриманих результатів. Все це віддзеркалює особистий внесок Серденко Т.В. у фундаментальну науку з проблеми, важливої для сучасної біофізики.

Повнота викладу наукових положень, висновків і рекомендацій, які сформульовані у дисертації та в опублікованих працях. Результати досліджень, основні положення і висновки дисертації знайшли повне відображення у змісті автореферату дисертації. Матеріали дисертації апробовані на вітчизняних та міжнародних наукових конференціях, опубліковані у 30 друкованих працях, з яких – 11 статей у фахових наукових виданнях та 19 тез доповідей у матеріалах наукових конференцій.

Висновок. Дисертаційна робота Серденко Т.В. є змістовою, закінченою самостійною науковою роботою з біофізики, в якій одержано низку нових і цікавих даних, важливих як у теоретичному, так і практичному аспектах. Вважаю, що за своєю актуальністю, методичним рівнем, обсягом проведених досліджень, новизною отриманих результатів, логічністю й

обґрунтованістю висновків дисертаційна робота «Фотоіндуковані зміни інтегральних показників структури реакційних центрів бактерій *Rhodobacter sphaeroides* при переносі електрона» відповідає вимогам п.п. 9, 11, 12, 13 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою КМУ №567 від 24.07.2013 р. (зі змінами, внесеними згідно з Постановами КМУ № 656 від 19.08.2015 р., № 1159 від 30.12. 2015 р. та № 567 від 27.07.2016 р.) до кандидатських дисертацій, а її авторка Таїсія Володимирівна заслуговує присудження її наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 03.00.02 – біофізика.

Офіційний опонент

доцент кафедри біофізики
та медичної інформатики
ННЦ «Інститут біології та
медицини» Київського
національного університету
імені Тараса Шевченка

кандидат к.ф.-м.н.,
доцент О.В. Оглобля

Підпис О.В. Оглоблі засвідчує:

Вчений секретар НДЧ

Київського національного університету

імені Тараса Шевченка

Під час засідання
Вченого секретаря НДЧ
Караульна Н.В.
15.04.2021 р.

Н.В. Карапульна

