

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.014.02 НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
НАУКИ ИНСТИТУТА ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКИ И ГОРЕНИЯ  
ИМ. В. В. ВОЕВОДСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ  
АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ  
СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 22.01.2020 , № 1

О присуждении Панову Михаилу Сергеевичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата химических наук.

Диссертация *«Косвенное детектирование короткоживущих интермедиатов реакций с участием биологически важных молекул методом импульсного ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ »* в виде рукописи по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» принята к защите 23 октября 2019 г., протокол № 8, диссертационным советом Д 003.014.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической кинетики и горения им. В. В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук (ИХКГ СО РАН), Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, д. 3, приказ о создании диссертационного совета № 1511/нк-от 25.11.2016 года.

Соискатель, *Панов Михаил Сергеевич*, 1992 года рождения, на момент защиты диссертации работает в должности младшего научного сотрудника Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института «Международный томографический центр» Сибирского отделения Российской академии наук (МТЦ СО РАН). В 2014 году соискатель окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» (НГУ). С 2014 года М.С. Панов работал в МТЦ СО РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории фотохимических радикальных реакций МТЦ СО РАН.

*Научный руководитель* – доктор физико-математических наук, *Юрковская Александра Вадимовна*, главный научный сотрудник лаборатории фотохимических радикальных реакций МТЦ СО РАН.

*Официальные оппоненты: Лешина Татьяна Викторовна*, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник ИХКГ СО РАН; *Клочков Владимир Васильевич*, доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник научной лаборатории ЯМР кафедры медицинской физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Казанский (Приволжский) федеральный университет" - дали **положительные отзывы** на диссертацию.

*Ведущая организация:* Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук, в своём **положительном заключении**, подписанном доктором физико-математических наук, заведующим лабораторией спиновой динамики и спинового компьютеринга *Фельдманом Эдуардом Беняминовичем*, утверждённом временно исполняющим обязанности директора доктором физико-математических наук *Ломоносовым Игорем Владимировичем*, указала, что данная диссертационная работа удовлетворяет требованиям п. 9 Положения «О порядке присуждения учёных степеней», утверждённом Постановлением правительства РФ от 24.09.2013 №842, а её автор, Панов М.С., заслуживает присвоения ему искомой учёной степени кандидата химических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Соискатель опубликовал 7 научных работ (из них 6 по теме диссертации), опубликованных в отечественных и международных рецензируемых научных изданиях, входящих в список ВАК, общим объёмом 62 стр. Шесть работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов. Личный вклад соискателя в опубликованные работы составляет примерно 80%.

*Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:*



1. **Panov M.S.**, Bielytskyi P., Gräsing D., Yurkovskaya A.V., Matysik J., Same spectral signature in liquid-state and solid-state  $^1\text{H}$  photoCIDNP NMR spectra of cyclohexanone // *Molecular Physics* – 2019. – V. 117, №19. – P.2756-2761
2. Morozova O. B., **Panov M. S.**, Fishman N. N., Yurkovskaya A. V. Electron transfer vs proton-coupled electron transfer as the mechanism of reaction between amino acids and triplet-excited benzophenones revealed by time-resolved CIDNP // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2018. – V. 20, № 32. – P. 21127-21135
3. Morozova O. B., **Panov M. S.**, Vieth H.-M., Yurkovskaya A. V. CIDNP study of sensitized photooxidation of S-methylcysteine and S-methylglutathione in aqueous solution. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. 2016. 321: 90-98.
4. Kuznetsov N. A., Kiryutin A. S., Kuznetsova A. A., **Panov M. S.**, Barsukova M. O., Yurkovskaya A. V., Fedorova O. S. The formation of catalytically competent enzyme-substrate complex is not a bottleneck in lesion excision by human alkyladenine DNA glycosylase. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*. 2017. 35: 950-967.
5. **Panov, M. S.**, Pravdivtsev, A. N., Ivanov, K. L., Yurkovskaya, A. V., Vieth, H.-M. Coherent Polarization Transfer Effects Are Crucial for Interpreting Low-Field CIDNP Data. *Appl. Magn. Reson*. 2014. 45, 9, 893
6. **Panov, M. S.**, Saprygina N.N., Morozova O.B., Kiryutin A.S., Grishin Y.A., Yurkovskaya A. V. Photooxidation of Histidine by 3,3',4,4'-Benzophenone Tetracarboxylic Acid in Aqueous Solution: Time-Resolved and Field-Dependent CIDNP Study. *Appl. Magn. Reson*. 2014. 45, 10

На автореферат диссертации поступило 5 отзывов. Все отзывы положительные, из них 4 содержат замечания. Отзывы поступили от:

кандидата физико-математических наук **Ямалетдинова Руслана Дамировича**, научного сотрудника лаборатории физикохимии наноматериалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук; в отзыве два замечания, связанные с отсутствием обсуждения причин значительного изменения  $pK_a$  концевой аминогруппы для радикала Cys(Me) по сравнению с исходной молекулой, отсутствием в автореферате структуры циклического радикала Cys(Me) и совпадением  $g$ -факторов радикалов Cys(Me) и GS(Me).



кандидата технических наук *Николаева Назара Александровича*, старшего научного сотрудника лаборатории информационной оптики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт автоматизации и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук; отзыв без замечаний.

кандидата физико-математических наук *Колоколова Даниила Игоревича*, научного сотрудника группы ЯМР спектроскопии каталитических превращений углеводов Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук»; имеется замечание по результату, связанному с наблюдением спектра  $^1\text{H}$  ХПЯ в твердой матрице при вращении под магическим углом – требуется указать температуру измерения и в чем отличительная особенность полученного результата от представленных в литературе работ.

кандидата физико-математических наук *Стася Дмитрия Владимировича*, старшего научного сотрудника лаборатории быстропротекающих процессов ИХКГ СО РАН, в отзыве содержится ряд замечаний, связанных с существенным отличием  $pK_a$  концевой аминогруппы катион-радикала S-метилцистеина (4.3) от аналогичной величины для нейтральной молекулы (9.0); со слишком кратким обсуждением второй и третьей частей экспериментальной главы на с.13-14; с просьбой дать пояснения об относительных константах СТВ и надежности расчетов констант СТВ методами квантовой химии; с просьбой указать связь между совпадением расчетных констант с экспериментальными и выводами о механизмах реакций; с просьбой прокомментировать литературные данные по наблюдению твердотельного  $^1\text{H}$  фото-ХПЯ эффекта.

кандидата химических наук *Ельцова Ильи Владимировича*, доцента кафедры общей химии Факультета естественных наук НГУ, в отзыве содержится замечание, что в стремлении донести информацию до читателя, соискатель слишком сильно упростил текст, опустив практически полностью все экспериментальные данные и оставив только смысловое описание.

В положительном заключении ведущей организации имеются замечания, связанные с отсутствием пояснений к выбору базиса для DFT расчетов констант СТВ и g-факторов и точности полученных магниторезонансных параметров; отсутствием



литературных ссылок на времена таутомерных превращений в радикалах; с отсутствием оценки точности общего линейного соотношения для констант СТВ  $^{13}\text{C}$ , с отсутствием указания, на каких орбиталях локализован электрон в радикале гистидина.

**В положительных отзывах** оппонентов в качестве замечаний указываются:

автор не всегда использует столь уникальные возможности использованного в работе ЯМР спектрометра для решения задач установления химического строения органических соединений в растворах с помощью двумерной ЯМР спектроскопии, что вызывает вопросы, связанные с соотношением сигналов ЯМР на ядрах  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  исследуемых соединений (*Клочков В.В.*). Есть претензии к оформлению текста и рисунков в диссертации (*Клочков В.В.*), а так же избытию научного жаргона, что затрудняет понимание некоторых мест диссертации (*Лешина Т.В.*).

Во всех отзывах отдельно отмечается, что указанные замечания не снижают научной и практической значимости диссертационной работы. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа Панова М. С. **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК предъявляет к кандидатским диссертациям, а ее автор – Панов М. С. – заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

*Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается* компетентностью оппонентов и сотрудников ведущей организации в области ядерного магнитного резонанса, что подтверждается наличием у них публикаций ряда научных работ в данной области исследований, в том числе соответствующих тематике диссертационного исследования соискателя и опубликованных в ведущих российских и международных журналах и изданиях.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

- показано, как изменяются константы равновесия процесса открытия-закрытия пар оснований тридекамерных ДНК дуплексов при химической модификации азотистого основания в седьмом положении дуплекса



- определены структуры радикальных интермедиатов в реакциях фотоокисления различных аминокислот и трипептида S-метилглутатиона карбоксипроизводными бензофенона и, исходя из полученных данных, предложены механизмы реакций

- показано, что, при достаточно быстром вращении под магическим углом возможна регистрация  $^1\text{H}$  ХПЯ в кристаллической матрице

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

- полученный твердотельный спектр  $^1\text{H}$  ХПЯ указывает на сходство механизмов возникновения ХПЯ в жидкости и твердом теле при фотовозбуждении органических молекул

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:** полученные данные о константах СТВ ядер  $^{13}\text{C}$  позволили определить структуру радикала 3,3',4,4'-тетракарбоксибензофенона, что в свою очередь позволило определить механизм реакции фотоокисления ароматических аминокислот. Кроме того, в результаты работы по измерению констант равновесия процесса открытия-закрытия пар оснований позволили сказать, что на скорость процесса репарации влияет кинетика гидролиза гликозидной связи, а не скорость прихода ДНК дуплекса в реакционноспособную конформацию.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:** *сделанные выводы и полученные научные результаты* основаны на применении современных экспериментальных и теоретических методов и подходов; *проведены* тщательные экспериментальные измерения и сопоставление полученных результатов с известной совокупностью экспериментальных и теоретических данных. Соискателем подробно изучен предыдущий опыт и достижения других авторов, *проведены* многие дополнительные эксперименты и расчёты, подтверждающие надежность и достоверность полученных в диссертации результатов; *полученные результаты* не противоречат данным, опубликованными в литературе.

**Личный вклад соискателя состоит** в сборе и анализе литературных сведений по теме диссертации; подготовке и проведении всей экспериментальной работы, а также выполнении всех численных расчётов и оценок. Соискатель принимал непосредственное участие в постановке научных задач, решаемых в данной диссертационной работе; анализе и обсуждении полученных результатов



исследований, формулировке выводов. Подготовка публикаций по теме диссертации осуществлялась совместно с соавторами работ и руководителем диссертации.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне и представляет собой цельное законченное исследование с актуальными задачами и содержательными, фундаментальными и практически важными результатами. Материалы диссертации соответствуют специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества по области исследования «спиновая динамика и спиновая химия» (п. 5 паспорта специальности) и «строение, структура и реакционная способность интермедиатов химических реакций» (п. 6 паспорта специальности). Совокупность полученных результатов может стать хорошей основой для дальнейшего исследования короткоживущих интермедиатов реакций с участием биологически важных молекул.

На заседании 22 января 2020 г. диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация соответствует п.9 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842, и принял решение присудить **Панову Михаилу Сергеевичу** учёную степень кандидата химических наук по специальности 01.04.17 – «химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании и голосовании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени - 22, против присуждения ученой степени - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Заместитель председателя диссертационного совета,

д-р. физ.-мат. наук, профессор

 Дзюба Сергей Андреевич

Ученый секретарь диссертационного совета,

канд. хим. наук

 Поздняков Иван Павлович

«24» января 2020 г.

