

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Хреновой Марии Григорьевны «Интерпретация и прогнозирование свойств белковых систем методами суперкомпьютерного молекулярного моделирования», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Диссертация Хреновой Марии Григорьевны посвящена одной из наиболее актуальных и активно развивающихся тем современной биологии – изучению механизмов функционирования белковых комплексов. Объектами исследования были выбраны такие важные для биомедицинских и биотехнологических приложений белковые макромолекулы как матриксная металлопротеиназа ММР-2, пенициллинацилаза, комплексы малых ГТФаз с белками-ускорителями, а также фоторецепторные макромолекулы – флаavin-содержащие белки, белки семейства зеленого флуоресцентного белка и их комплексы, термостабильный бактериальный комплекс фотосинтетического реакционного центра и коровой антенны. При использовании комбинированного метода квантовой и молекулярной механики для этой группы биологических систем сформулированы механизмы происходящих с их участием молекулярных процессов, предложены способы их улучшения.

Теоретическая и практическая значимость работы Хреновой М. Г. не вызывает сомнений. Полученные в работе Марии Григорьевны результаты не только позволяют адекватно интерпретировать имеющиеся экспериментальные данные, но и планировать новые эксперименты для подтверждения предложенных механизмов функционирования биологических систем, а также создавать новые системы с заданными свойствами. Так, разработанные в диссертации ингибиторы на основе олигопептидов и их миметиков могут быть использованы при создании терапевтических средств для борьбы с метастазированием. Предложенная точечная мутация в флуоресцентном флаavin-содержащем белке позволила расширить его палитру. Найденое структурное объяснение термической устойчивости комплекса LHI-RC *T. tepidum* важно и может быть использовано при создании биологических фотопреобразователей солнечной энергии. И это далеко не полный перечень достижений автора.

Результаты, полученные автором, опубликованы в тридцати пяти высокорейтинговых международных и российских научных журналах, апробированы на международных и российских научных конференциях. Автореферат диссертации представляет все ее разделы в компактной и емкой форме, он прекрасно оформлен и снабжен рисунками и схемами, облегчающими восприятие представленного экспериментального материала.

Считаю, что диссертация Хреновой М. Г. является фундаментальным научным исследованием, которое по актуальности темы, объему экспериментального материала, новизне и практической значимости отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени доктора наук (п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г.). Автор диссертации Хренова М.Г., безусловно, заслуживает

присвоения искомой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Ведущий научный сотрудник **Васильева Людмила Григорьевна**

Лаборатории первичных процессов фотосинтеза

Института фундаментальных проблем биологии РАН,

г. Пушкино Московской обл., ул. Институтская, 2

доктор биологических наук (03.01.04 - биохимия)



Васильева Л.Г.

