

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертационной работы 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

Работа посвящена молекулярному моделированию механизмов ферментативных реакций и фотохимических процессов. Основным методом, который применяется в данной работе – комбинированный метод квантовой механики / молекулярной механики, являющийся наиболее перспективным для изучения таких систем. Особенность данной работы состоит в том, что автор не ограничивается только интерпретацией экспериментальных данных, но на основании проведенных расчетов прогнозирует новые системы с требуемыми свойствами.

В работе изучены механизмы ферментативных реакций в пенициллинацилазе, матриксной металлопротеиназе-2 и комплексах малых ГТФаз с белками ускорителями. Для матриксной металлопротеиназы-2 предложены ингибиторы, прошедшие успешную экспериментальную проверку. Полностью изучены фотоциклы белков BLUF и iLOV, содержащих флавин в качестве хромофорной группы, и предложена аминокислотная замена, приводящая к смещению максимумов полос поглощения и флуоресценции в красную область спектра. Также на основании проведенных расчетов даны рекомендации по модификации сенсора на каспазу-3 для расширения его динамического диапазона; экспериментальная проверка подтвердила результаты расчетов.

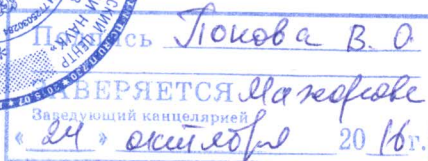
Результаты работы многократно докладывались на российских и международных конференциях и опубликованы в 33 статьях в рецензируемых научных изданиях, что свидетельствует о высоком уровне проведенных исследований.

Полнота проведенного исследования, научная новизна и апробация результатов позволяет считать, что диссертационная работа Хреновой М.Г. полностью соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к работам на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.17 – математическая и квантовая химия, а её автор, Хренова Мария Григорьевна, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук.

Директор ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН
член-корр. РАН, профессор
доктор химических наук по специальности 03.00.04

Попов Владимир Олегович

ФГУ Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН
Адрес: 119071 Российская Федерация, г. Москва, Ленинский проспект, дом 33, строение 2
Тел: +7(495)9545283
E-mail: vpopov@inbi.ras.ru



24.10.2016 г.