

## 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  
(специальность 02.00.17 – математическая и квантовая химия)

В работе представлены результаты исследования механизмов биохимических процессов в ферментах и фоторецепторных белках с применением современных методов суперкомпьютерного молекулярного моделирования. Особенность данной работы состоит в том, что автор уделяет большое внимание сопоставлению экспериментальных данных с полученными по результатам расчетов, а также прогнозирует свойства новых белковых систем.

В работе полностью охарактеризован фотоцикл бактериальных рецепторов синего света с флавином в качестве хромофорной группы; предложен новый сенсор на каспазу-3, работающий не только *in vitro*, но и в клетке; получены новые данные по механизму протеолиза матричной металлопротеиназы и поиску её ингибиторов; изучен механизм реакции гидролиза ГТФ комплексами малых ГТФаз с белками-ускорителями и даны рекомендации по его экспериментальной верификации; определена трехмерная структура бактериального фотосинтетического центра.

Результаты работы опубликованы в 33 статьях в рецензируемых научных изданиях, в том числе в высокорейтинговых международных изданиях, а также апробированы на российских и международных конференциях, что свидетельствует о высоком уровне проведенных исследований.

В качестве замечания можно отметить следующее: автор проводит расчеты для миметика олигопептида, содержащего кетометиленовый фрагмент, ингибирующего ММР-2, однако не приводит полученных теоретически данных по константе ингибирования, что было бы правильно сравнить с полученным экспериментальным значением.

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.

заведующий кафедрой химии природных соединений  
член-корр. РАН  
профессор доктор химических наук  
(02.00.15 – биорганическая химия)

ФГБОУВО «Московский государственный университет  
имени М.В.Ломоносова»  
Адрес: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1  
Тел: +7(495)9328824  
E-mail: dontsova@belozersky.msu.ru

Донцова Ольга Анатольевна



14.10.2016 г.