

## 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 актуальные исследования биомолекулярных систем современными методами суперкомпьютерного молекулярного моделирования, среди них ферменты и фоторецепторные белки. Один из важных результатов состоит в том, что автору работы удалось напрямую сопоставить результаты расчетов энергетических профилей реакций с экспериментальными данными по кинетике единичного каталитического цикла.

В работе получены новые данные по механизму протеолиза матричной металлопротеиназы и поиску её ингибиторов, по механизму реакции гидролиза ГТФ комплексами малых ГТФаз с белками-ускорителями и даны рекомендации по проведению экспериментов для верификации полученного механизма; полностью охарактеризован фотоцикл бактериальных рецепторов синего света с флавином в качестве хромофорной группы; предложен новый сенсор на основе GFP-подобных белков, работающий по принципу резонансно-индуктивного переноса энергии, определена трехмерная структура бактериального фотосинтетического центра. Помимо интерпретации существующих экспериментальных данных в работе даны прогнозы по модификации систем для привнесения новых свойств, что было проверено экспериментально и подтвердило сделанные на основе моделирования предположения.

Результаты, полученные в работе, опубликованы в 33 статьях в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ, а также апробированы на российских и международных конференциях.

В качестве замечания к автореферату следует отметить следующее: непонятно, почему на рис. 11 автореферата стационарные точки, соответствующие минимумам, отмечены разным цветом.

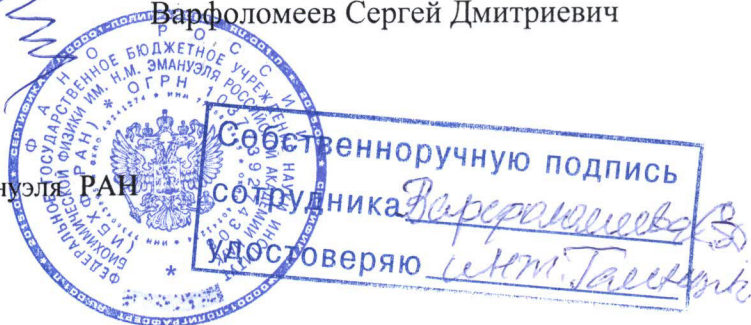
Однако, несмотря на сделанное замечание, по актуальности исследования, новизне, объему материала, достоверности и значимости полученных результатов диссертационная работа Хреновой М.Г. полностью отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к докторским диссертациям и соответствует всем требованиям п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842, а соискатель, Хренова Мария Григорьевна, заслуживает

присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности  
02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Научный руководитель института  
член-корр. РАН  
профессор доктор химических наук  
(02.00.15 – кинетика и катализ)

 Варфоломеев Сергей Дмитриевич

Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки  
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН  
Адрес: 119334, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4  
Тел: +7(499)135-7894,  
Факс: +7(499)137-4101  
E-mail: sdvarf@sky.chph.ras.ru



12.10.2016 г.