

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

Диссертационная работа Хреновой М.Г. посвящена изучению механизмов ферментативных реакций и фотохимических процессов современными методами молекулярного моделирования, включая методы квантовой химии, комбинированный метод квантовой механики / молекулярной механики и метод молекулярной динамики.

В работе получены результаты по механизмам ряда ферментативных реакций: гидролиза пенициллина пенициллинацилазой, протеолиза олигопептида матричной металлопротеиназой MMP-2, гидролиза ГТФ комплексами малых ГТФаз с белками-ускорителями; а также фотохимических процессов: изучен полный фотоцикл BLUF доменов, интерпретированы свойства ряда флуоресцентных белков на основе флавина и родственных GFP.

На основании полученных механизмов автор делает предсказания новых систем с интересующими свойствами, в частности, предложены ингибиторы MMP-2, прошедшие успешную экспериментальную проверку, разработаны пути модификации сенсора на каспазу-3, наблюдаемые впоследствии в эксперименте.

Автором представлен большой массив результатов, что находит отражение в большом количестве опубликованных работ: 33 статьи в рецензируемых научных изданиях и 2 статьи в тематических сборниках.

Научная новизна и апробация результатов, а также полнота проведенного исследования 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 ее автор, Хренова Мария Григорьевна, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук.

профессор доктор физико-математических наук
03.00.02 – Биофизика



Ризниченко Галина Юрьевна

ФГБОУВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»
Адрес: 119991 Российская Федерация, г. Москва, Ленинские горы д. 1
Тел: +7(495)9390289
E-mail: riznich@biophys.msu.ru

01.11.2016 г.

ПОДПИСЬ
ЗАВЕРЯЮ

Документовед

