

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертационной работы Метелешко Юлии Игоревны

«Молекулярное моделирование мутантных форм флуоресцентных белков на основе LOV доменов с измененными спектральными свойствами», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Применение современных методов суперкомпьютерного молекулярного моделирования открывает возможности для интерпретации существующих экспериментальных данных и предсказания свойств новых белковых систем, что является актуальным. В работе рассматривается применение таких методов для поиска новых флуоресцентных белков на основе флавина с измененными спектральными свойствами по сравнению с описанными в литературе. Автор использует разнообразный арсенал методов, включая методы квантовой химии, комбинированный метод квантовой механики / молекулярной механики и метод молекулярной динамики для решения поставленных задач. В результате работы автором предложен набор аминокислотных замен, влияющих на положения максимумов полос поглощения и флуоресценции хромофорной группы флавиномононуклеотида, а также предложено введение аналогов этого хромофора со спектрами поглощения и флуоресценции, смещенными в длинноволновую область.

Результаты, полученные в работе, опубликованы в 4 статьях в рецензируемых научных изданиях, а также апробированы на российских и международных конференциях.

Диссертационная работа по своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости полученных результатов соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а её автор, Метелешко Ю.И., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4- «Физическая химия».

Кузьмин Владимир Александрович,

заведующий лабораторией процессов фотосенсибилизации Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН (ИБХФ РАН), доктор химических наук по специальности 1.4.4 – «физическая химия», профессор по специальности 1.4.15 - кинетика и катализ.

Адрес: 119334, Москва, ул. Косыгина, д. 4. Тел. 8-495-939-73-41 E-mail: vak@sky.chph.ras.ru



/Кузьмин В.А./

Подпись д.х.н. проф. Кузьмина В.А. заверяю,

ученый секретарь ИБХФ РАН,

к.б.н. Скалацкая Светлана Ивановна



Скалацкая С.И./

06 июня 2023 г.