

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

В работе представлены результаты исследования фотофизических свойств флуоресцентных белков на основе LOV доменов методами суперкомпьютерного молекулярного моделирования. Автор использует широкий арсенал методов, включая методы описания возбужденных электронных состояний для расчета энергий электронных переходов и поиска минимумов на поверхности потенциальной энергии возбужденного электронного состояния. Проведенные автором исследования позволили сделать фундаментальные выводы о влиянии белкового окружения на фотофизические свойства флавина, а также предложить варианты аминокислотных замен, приводящих к смещению полос поглощения и флуоресценции в длинноволновую область. Важно отметить, что после опубликованных автором диссертации вычислительных научных работ появились экспериментальные исследования, которые подтверждают ряд высказанных в работе предложений по аминокислотным модификациям.

Автореферат полностью обосновывает сделанные в работе в выводы. К незначительным недостаткам можно отнести неудачные выражения и опечатки.

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.

Заведующий лабораторией физической биохимии ФИЦ «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН
профессор, доктор химических наук (03.00.04 – биохимия)

Савицкий Александр Павлович

ФГУ Федеральный исследовательский центр «Фундаментальные основы биотехнологии» РАН
Адрес: 119071 Российская Федерация, г. Москва, Ленинский проспект, дом 33, строение 2
Тел: +7(495)9548725
E-mail: apsavitsky@inbi.ras

09 июня 2023 г.

