

Отзыв научного руководителя

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

Метелешко Ю.И. поступила в очную аспирантуру на кафедру физической химии химического факультета Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова» в 2016 году и окончила ее в 2020 г. В 2020 г. защитила научно-квалификационную работу «Молекулярное моделирование мутантных форм флуоресцентного белка iLOV с измененными спектральными свойствами» с оценкой «отлично». В настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника кафедры физической химии химического факультета МГУ.

Метелешко Ю.И. в период 2016-2023 гг. подготовила диссертационную работу по теме «Молекулярное моделирование мутантных форм флуоресцентных белков на основе LOV доменов с измененными спектральными свойствами» в лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова. Текст автореферата отражает суть и этапы выполненной работы, где приведены все полученные самостоятельно или в соавторстве теоретические данные и их подробный анализ.

Работа Метелешко Ю.И. «Молекулярное моделирование мутантных форм флуоресцентных белков на основе LOV доменов с измененными спектральными свойствами» посвящена решению актуальной задачи – исследованию флуоресцентных белков на основе LOV доменов и предложению способов получения их новых вариантов с батохромным сдвигом полос поглощения и флуоресценции. Получение флуоресцентных белков на основе LOV доменов с батохромными сдвигами позволит расширить возможности их применения.

В ходе работы Метелешко Ю.И. исследовала структуры и спектральные свойства флуоресцентных белков на основе LOV доменов. Для флавиносодержащего флуоресцентного белка iLOV были рассмотрены различные мутантные формы, для которых при помощи молекулярно-динамических траекторий были отобраны только системы с определенными структурными особенностями хромофор связывающего кармана. Это позволило предложить ряд мутантных форм белка iLOV, обладающих батохромными сдвигами полос поглощения и испускания различной величины. Для получения еще больших сдвигов были рассмотрены варианты iLOV с модифицированным хромофором и различные мутантные формы на его основе. Таким образом были предложены варианты флуоресцентных белков на основе LOV доменов, обладающие еще большими батохромными сдвигами спектральных полос. Моделирование обратимо фотопереключаемых белков rsLOV1, rsLOV2, а также их дикого типа YtvA-LOV позволило определить отличия в динамическом поведении α спирали и боковой цепи аминокислотного остатка глутамина Q123.

В процессе работы над диссертацией Метелешко Ю.И. успешно освоила широкий спектр современных методов вычислительной и квантовой химии. В работе были получены важные результаты по батохромному сдвигу спектральных полос в LOV доменах

Диссертационная работа Метелешко Ю.И. представляет собой целостное научное исследование, обладает научной новизной и практической значимостью.

Метелешко Ю.И приняла участие в международных и российских конференциях. По теме работы было опубликовано 4 статьи в журналах, индексируемых Web of Science, Scopus, RSCI.

Во время работы в лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования являлась исполнителем грантов РФФИ и РНФ.

Метелешко Ю.И. показала себя квалифицированным специалистом в области вычислительной и квантовой химии, способной самостоятельно решать научные задачи.

Как научный руководитель считаю, что представленная диссертационная работа является законченным исследованием, отвечающим требованиям пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова к работам, представленным на соискание ученой степени кандидата химических наук.

Профессор кафедры физической химии
химического факультета ФГБОУ ВО
«Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова»,
профессор РАН, доктор физико-
математических наук (специальность
02.00.17 – математическая и квантовая
химия)

М.Г. Хренова
Телефон: +7 495 939 48 40
E-mail: khrenovamg@my.msu.ru



17.04.2023

