

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **МЕДВЕДЕВА Кирилла Евгеньевича** «Компьютерное исследование влияния высокого давления и температуры на структуру и функцию РНК-связывающего белка семейства NIP7 архей», представленной на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 03.01.09 «Математическая биология, биоинформатика»

Диссертационная работа Медведева К.Е. посвящена изучению молекулярных механизмов адаптации белков архей к экстремальным условиям повышенных температур и давления методами математической биологии и биоинформатики. Актуальность исследования обусловлена необходимостью формирования систематического подхода к установлению связи между структурной организацией белков и стабильностью функционально активной конформации. Для решения поставленной задачи Медведев К.Е. использует широкие возможности методов молекулярного моделирования и биоинформатики, эффективность которых в последнее время растет в связи с развитием суперкомпьютерных технологий.

Автореферат Медведева К.Е. хорошо оформлен, имеет четкую логическую структуру и дает адекватное представление о проделанной диссертантом работе. Приведено описание процедуры молекулярного моделирования структуры белка NIP7 архей, обитающих в различных естественных средах, а также оригинального подхода для сравнительного статистического анализа основных структурных характеристик компьютерных моделей белков NIP7 архей. В основной части работы детально описаны различия во флуктуации доменов белка NIP7, охарактеризованы наиболее подвижные участки, сделаны предположения относительно биологической сути наблюдаемых явлений. На основании полученных данных компьютерного дизайна предложен механизм адаптации белков NIP7 архей к экстремальным условиям высоких давлений и температур. Результаты, полученные Медведевым К.Е., имеют важное значение для дальнейшего изучения механизмов адаптации белков к условиям среды и поиска структурных факторов, обуславливающих стабильность активной конформации белковой глобулы. В целом, работа Медведева К.Е. представляет как фундаментальный, так и практический интерес.

Некоторые вопросы вызывает методическая часть биоинформатического исследования. В автореферате (стр. 13) приводятся результаты поиска специфических позиций подсемейств, связанных с адаптацией белков к экстремальным условиям, полученные с помощью программ GroupSim и multiHarmony. Однако непонятно, чем обусловлен выбор этих программ для проведения исследования, а также их применимость в конкретном случае. Возможно, эти вопросы детально рассмотрены в самой диссертации. Автор также мог обратить внимание на то, что для поиска специфических позиций подсемейств разработаны отечественные алгоритмы и программное обеспечение, в том числе Mirny & Gelfand (2002) *J.Mol.Biol.*, Kalinina et al. (2004) *Protein Science*, Suplatov et al. (2014) *J.Biomol.Struct.Dyn.*, Suplatov et al. (2014) *Nucl. Acids Res.*

Автореферат диссертации показывает, что по актуальности поставленных целей и задач, методическому уровню, научной и практической значимости полученных результатов Медведев К.Е. заслуживает присуждения ученой степени кандидата биологических наук.

Ст.н.с. НИИ ФХБ имени А.Н.Белозерского
МГУ имени М.В.Ломоносова, к.х.н

Суплатов
Дмитрий Андреевич

119992, Москва,
Ленинские горы,
дом 1, стр. 40

"13" января 2015 г.

