

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Федорова Владимира Андреевича «Молекулярное моделирование образования комплексов электрон-транспортных белков пластоцианина и цитохрома f », представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 03.01.09 – математическая биология, биоинформатика

Диссертация Федорова В.А. несомненно представляет собой интересное и важное исследование в области молекулярной биологии и биофизики и посвящена изучению особенностей механизма комплексообразования белковых структур в активных центрах фотосинтезирующих организмов. Использование и развитие в данной области знаний современных методов молекулярного моделирования крайне актуально как для углубленного понимания структурно-функциональной организации белковых электрон-транспортных систем, так и для разработки новых классов биологически активных лекарственных препаратов.

В данной работе весьма удачно сопряжено применение вычислительного аппарата броуновской и молекулярной динамики с кластерным анализом ансамблей возникающих структур для оценки степени устойчивости образующегося активного комплекса пластоцианина и цитохрома f у разных видов организмов. Особое внимание здесь уделено учету влияния условий внешней среды на ход этого процесса. При этом впервые показано, что для случая цианобактерий типа *Nostoc* диффузно-столкновительный путь формирования активного центра выявляет конформационные изменения у цитохрома f в области петли G188E189D190, которые компактизуют его с пластоцианином и таким образом значительно стабилизируют весь комплекс. У высших растений *Brassica trapa*, *Spinacia oleracea* и зеленой водоросли *Chlamydomonas reinhardtii* молекула цитохрома f ведет как относительно жесткое тело. Активный центр здесь формируется без каких-либо существенных конформационных перестроек и с окончательной структурой, реализованной за счет вкладов обычных гидрофобных и ван-дер-ваальсовых взаимодействий пластоцианина и цитохрома.

Отмечена перспективность разработанного подхода для поиска белковых соединений и комплексов, обладающих заданными свойствами, для целей применения их в биотехнологических задачах и медицине.

В целом, судя по реферату, по своему содержанию, фундаментальной значимости и новизне полученных результатов кандидатская диссертация В.А.Федорова вполне удовлетворяет требованиям ВАК, а ее автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 03.01.09 – математическая биология, биоинформатика.

Отзыв составил Комаров Владислав Михайлович, д.ф.-м.н.

Институт биофизики клетки Российской академии наук – обособленное подразделение Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Пушкинский научный центр биологических исследований Российской академии наук»

Адрес: 142290, г.Пушино, Московской области, Институтская, 3, ИБК РАН

Телефоны: (4967) 73-06-81, (4967) 73-94-16,

Электронная почта: komarov@icb.psn.ru

Ведущий научный сотрудник
Института биофизики клетки РАН
д.ф.-м.н.

В.М.Комаров

Владислав Комаров
Ученый секретарь ИБК РАН
(Мальков И.С.)

3.10.2019

