

Отзыв научного руководителя
о выпускной квалификационной работе
Гащенко Екатерины Александровны
**«Алгоритмы детектирования нестандартных аминокислот
в пептидных антибиотиках»**

Одним из ключевых подходов к установлению первичной структуры белков и пептидов является их *de novo* секвенирование по данным масс-спектрометрии. Преимущество этого подхода по сравнению с идентификацией белков и пептидов по базам данных заключается в том, что он позволяет анализировать ранее неизвестные соединения. В то же время для успешного применения *de novo* секвенирования необходимы масс-спектры очень хорошего качества. В частности, при анализе белков и пептидов рекомендуется использовать данные масс-спектрометрии высокого разрешения. Однако, наряду с аккуратностью, таким масс-спектрам присуща сложная структура, что затрудняет их интерпретацию.

В недавней работе Маршалла Берна и др. (Bern et al., 2019) был предложен подход, позволяющий анализировать масс-спектры малых молекул, в основе которого лежит извлечение из этих масс-спектров так называемого «алфавита» – множества регулярно встречающихся масс, природа которых не обязательно известна заранее. Представляет интерес его адаптация к случаю обработки пептидных антибиотиков, потенциально содержащих нестандартные аминокислоты (на сегодняшний день таких аминокислот известно более 140). Изучению имеющихся для этого возможностей и была посвящена выпускная квалификационная работа Е.А. Гащенко.

В ходе работы Гащенко были тщательно проанализированы структурные особенности bottom-up масс-спектров высокого разрешения и предложена усовершенствованная версия метода Берна и соавторов, позволяющая эффективно определять аминокислоты, содержащиеся в исследуемых пептидах. Было продемонстрировано, что результирующий алгоритм позволяет детектировать и модифицированные аминокислоты, что свидетельствует о возможности его применения также для обнаружения нестандартных аминокислот.

Исследование выполнено Гащенко добросовестно и самостоятельно. Полученные результаты содержательны и могут послужить основой дальнейших исследований в выбранном направлении. Программное обеспечение, разработанное Гащенко, свидетельствует о ее высокой квалификации как программиста.

Считаю, что выпускная квалификационная работа Е.А. Гащенко заслуживает оценки **“отлично”**.

Научный руководитель
к.ф.-м.н., зав. каф. биоинформатики и математической биологии
СПбАУ РАН им. Ж.И. Алферова

К.В. Вяткина

9 июня 2021 г.