

VII МОСКОВСКИЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ КОНГРЕСС  
«БИОТЕХНОЛОГИЯ: СОСТОЯНИЕ  
И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ»

*Россия, Москва, Новый Арбат, 36/9 (Здание Правительства Москвы)*

При поддержке  
Департамента науки,  
промышленной политики  
и предпринимательства  
города Москвы



SUPPORT:  
Department of science,  
industrial policy and  
entrepreneurship of Moscow

19 - 22 марта

**2013**

March, 19 - 22



СПОНСОР КОНКУРСА МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ:

ОАО «ИНСТИТУТ БИОТЕХНОЛОГИЙ  
ВЕТЕРИНАРНОЙ МЕДИЦИНЫ»

*Russia, Moscow, Novy Arbat, 36/9 (the House of Moscow Government)*

VII MOSCOW INTERNATIONAL CONGRESS  
“BIOTECHNOLOGY: STATE OF THE ART AND  
PROSPECTS OF DEVELOPMENT”

УДК 663.1+579+577.1

ББК 28.072

Б63

**VII МОСКОВСКИЙ МЕЖДУНАРОДНЫЙ КОНГРЕСС «БИОТЕХНОЛОГИЯ:  
СОСТОЯНИЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ» 19-22 МАРТА 2013 г.**

материалы VII Московского Международного Конгресса «Биотехнология:  
Состояние И Перспективы Развития» 19-22 Марта 2013 г.  
М.: ЗАО «Экспо-биохим-технологии», РХТУ им. Д.И. Менделеева,  
2013 – 560 с.

ISBN 5-7237-0372-2

УДК 663.1+579+577.1

ББК 28.072

ISBN 5-7237-0372-2

Настоящие материалы конгресса созданы в ООО «Экспоконсалтинг» на основании информации, предоставленной организаторами, экспонентами и рекламодателями выставки и конгресса. Заказчик: © 2013 ЗАО «Экспо-биохим-технологии»  
Материалы тезисов публикуются в авторской версии. Организаторы не несут ответственности за неточности и упущения в названиях и адресах, представленных в данном сборнике.

**VII MOSCOW INTERNATIONAL CONGRESS  
“BIOTECHNOLOGY: STATE OF THE ART AND PROSPECTS OF DEVELOPMENT”**

Proceedings of the VII Moscow International Congress  
“Biotechnology: State of the Art and Prospects of Development” (March 19-22, 2013, Moscow, Russia),  
Moscow: JSC “Expo-biochem-technologies”, D.I. Mendeleev University of Chemistry and Technology of Russia,  
2013 – 560 p.

ISBN 5-7237-0372-2

This Congress proceedings is issued by Expoconsulting, LTD by order of organizers of exhibition and congress on the basis of information given by exhibitors and advertisers.  
The customer: © 2013 JSC «Expo-biochem-technologies»

The abstracts materials are published in author's version. The Organizers do not bear responsibility for any errors or omissions regarding the names and addresses of the congress participants, presented in the collection.

## L-MOLKERN SOFTWARE FOR CAPTURING POLARIZATION EFFECTS IN FREE ENERGY CALCULATIONS

**Fomin E.S., Alemasov N.A.**

*Institute Cytology & Genetics SB RAS,  
av. Lavrentiev, 10, Novosibirsk, Russia*

We present a program, L-MOLKERN, for free energy difference calculations of single point mutations of proteins by the “alchemical”  $\lambda$ -dynamics. To include polarization effects and thus to increase the accuracy of calculations for mutations involving charged amino acid residues we have developed a new method, NET-Q, which is based on the equilibration principle of electronegativity.

For two single point mutations of barnase protein (PDBID: 1A2P), one of which is electrostatically neutral (A32G) and the other is charged (R72G), we calculated free energies differences by the L-MOLKERN. For the neutral mutation A32G, the free energy difference obtained is equal to  $\Delta G=37.6$  kJ/mol that is consistent, within the accuracy  $\pm 4$  kJ/mol of the AMBER force field, with the value of 36.1 kJ/mol obtained in [1]. As for the charged R72G mutation, our result  $\Delta\Delta G=19.8$  kJ/mol is much closer to the experimental value  $\Delta\Delta G_{exp}=10.45$  kJ/mol [2] than that of  $\Delta\Delta G_{calc}=57.67$  kJ/mol calculated without polarization effects in [1].

Thus, inclusion of polarization effects in free energy calculations provides a better agreement between calculated and experimental values for single point mutations involving charged amino acid residues. A detailed description of the methods used and calculation parameters was published in our previous paper [3].

[1] Seeliger D., de Groot B.L. *Biophysical Journal*. 2010. V. 98. No 10. P. 2309–2316.

[2] Kumar M.D., Bava K.A., et al. *Nucleic Acids Res*. 2006. V. 34. P. D204–D206.

[3] Fomin E.S., Alemasov N.A. *Russian Journal of Genetics: Applied Research*, 2012, Vol. 2, No. 6, pp. 453–461.

## СЕМЕЙСТВА ПЛАСТОМНЫХ БЕЛКОВ ЗЕЛЁНЫХ ВОДОРОСЛЕЙ И РАСТЕНИЙ

**Любецкий В.А., Селиверстов А.В., Зверков О.А.**

*Институт проблем передачи информации им. А.А. Харкевича РАН  
127994, г. Москва, ГСП-4, Большой Каретный переулок, 19, стр. 1*

Получена принципиально новая обширная база данных, описывающая семейства родственных пластомных белков из рано отделившихся ветвей Viridiplantae и видов с родственными пластидами, полученными в результате вторичного эндосимбиоза: *Euglena gracilis*, *E. longa* (из отдела Euglenozoa) и *Bigelowiella natans* (из группы Rhizaria). Для этого разработан оригинальный алгоритм кластеризации, адекватный задаче. База данных вместе с алгоритмом поиска кластеров по филогенетическому профилю белка (и другими функциями поиска и анализа) доступны по адресу <http://lab6.iitp.ru/ppc/viridiplantae/>. Кластеризация охватывает 3107 белков, из которых сформированы 204 одноэлементных кластера и 173 кластера, включающих более одного белка; среди них 103 содержат не более одного белка из каждого вида, 67 содержат пары белков из одного и того же вида, три кластера содержит по три белка из одного и того же вида. База данных позволила сделать ряд существенно новых биологических выводов. В том числе, на ее основе найдены семейства белков, специфичные для узких таксономических групп. Например, для Chaetophorales имеется ровно одно такое семейство, вероятно, связанных с делением пластид; для других таксономических групп того же уровня из Chlorophyta таких семейств не найдено. Это показывает значительную близость пластовов внутри этой группы Chlorophyta по сравнению с красными водорослями. Другой пример. Всего 29 семейств белков имеют пред-

ставителей в обоих видах *E. longa* и *E. gracilis*, 16 семейств содержат белок из *E. longa*, но не содержат белка из *E. gracilis*, а 38 семейств содержат белок из *E. gracilis*, но не содержат белка из *E. longa*. Наиболее часто белки пластома *E. longa*, отсутствующие в *E. gracilis*, имеют гомологи у водорослей *Chlorella vulgaris* и *Leptosira terrestris* из класса Trebouxiophyceae. Отсюда можно заключить, что донором пластид у *E. longa* и *E. gracilis* служит класс Trebouxiophyceae. Это согласуется с высокой частотой вхождения водорослей именно этого класса в состав симбиотических сообществ, включая лишайники и некоторые простейшие.

## PROTEIN FAMILIES IN PLASTOMES OF PLANTS AND GREEN ALGAE

**Luybetsky V.A., Seliverstov A.V., Zverkov O.A.**

*Institute for Information Transmission Problems, Russian Academy of Sciences*

*Bolshoy Karetniy lane 19/1, 127994 Moscow, Russia*

An representative database is constructed that contains protein families from early diverging Viridiplantae and lineages that acquired related plastids through endosymbiosis, *Euglena gracilis*, *E. longa* (Euglenozoa), and *Bigeloviella natans* (Rhizaria). The database is built with an originally developed clustering algorithm. The database and the algorithm that implements clustering along a protein phylogenetic profile and other search and analytic functionality are available at <http://lab6.iitp.ru/ppc/viridiplantae>. The total of 3107 proteins are clustered in 204 singlet and 173 non-singlet clusters; 103 clusters do not contain paralogs from the same species, 67 contain pairs of paralogs, and three clusters contain three paralogs. Analysis of the database enabled some essential biological inferences. Thus, we identified protein families specific for narrow taxonomic lineages. E.g., the Chaetophorales contain a single such family probably involved in the plastid division, while none was identified in other chlorophyte lineages of similar rank. This observation suggests the phylogenetic relatedness of plastids in Chlorophyta compared to those in red algae. Only 29 families occur in plastomes of both *E. longa* and *E. gracilis*, 16 are restricted to *E. longa*, 38 – to *E. gracilis*. The majority of protein families common for *E. longa* and *E. gracilis*, and families restricted to *E. longa* have homologs in the algae *Chlorella vulgaris* and *Leptosira terrestris* from the class Trebouxiophyceae. Most families restricted to *E. gracilis* are highly conserved. This observation suggests that the Trebouxiophyceae are evolutionary donors of plastids in *E. longa* and *E. gracilis*, which is in concordance with a wide occurrence of this taxonomic lineage of algae in various symbiotic communities, including lichens and some protists.

## КОРРЕЛЯЦИЯ СВОЙСТВ ПЕРВИЧНОЙ СТРУКТУРЫ ПРОМОТОРНЫХ ОБЛАСТЕЙ И КОДИРУЮЩИХ ЧАСТЕЙ ГЕНОВ НЕКОТОРЫХ ОДНОКЛЕТОЧНЫХ ОРГАНИЗМОВ

**Матушкин Ю.Г., Орлов Ю.Л., Лихошвай В.А., Левицкий В.Г.**

*Институт цитологии и генетики СО РАН,*

*630090, Новосибирск, пр. Лаврентьева 10*

В работе [1] был предложен индекс эффективности элонгации трансляции (Elongation efficiency index – EEI), позволяющий адекватно оценивать эффективность экспрессии генов в одноклеточных организмах на основе нуклеотидного контекста кодирующей части генов. Мы проанализировали связь между EEI и профилем формирования нуклеосом в промоторных районах на выборке генов двух видов дрожжей. Теоретические оценки потенциала формирования нуклеосом (NFP) были получены с помощью метода Recon. Экспериментальная оценка расположения нуклеосом была получена из данных по высокопроизводительному секвениро-