

## **Oponentský posudek disertační práce Mgr. Tomáše Pazderky** *„Study of protein structure and dynamics by means of optical spectroscopy“*

Doktorská disertační práce Mgr. Tomáše Pazderky je orientována na studium struktury a chování aminokyselin, proteinů a jejich derivátů metodami vibrační optické aktivity (VOA), tedy s využitím Ramanovy optické aktivity (ROA) a vibračního cirkulárního dichroismu (VCD). Jako komplementární metody jsou použity nepolarizované varianty vibrační spektroskopie – Ramanova a infračervená (IR). V práci jsou rovněž hojně využívány kvantově chemické výpočty a simulace k získání podrobných strukturních informací o studovaných systémech.

Předložená práce je obsahově velmi rozmanitá, pokrývá jak oblast metodické práce, tak velmi zajímavé a inovativní aplikace. Příkladem mohou být metodické práce zaměřené na korekci relativních intenzit pásů v ROA spektrech umožňující porovnání a přenositelnost dat získaných na různých typech přístrojů, vývoj VCD mikroinstrumentu či naopak aplikační studie orientovaná na supramolekulární chiralitu proteinových fibril. Jednoznačně musím konstatovat, že dosažené výsledky jsou velmi aktuální a jsou přínosem k rozvoji oboru.

Předložená disertační práce je členěna klasicky. Po úvodu se stručně zpracovaným shrnutím poznatků o struktuře a dynamice proteinů následuje část představující metody IR, Ramanovy, VCD a ROA spektroskopie v analýze proteinů. Je rovněž popsán 2D-korelační přístup a velmi stručně i metoda hlavních komponent (PCA). Toto vše v rozsahu 11 stran. Poté následuje přímo část výsledková (celkem 22 stran) se stručným popisem jednotlivých studií, které jsou v počtu 8 kusů nedílnou součástí disertační práce. Čtyři z nich autor řadí do kategorie metodických, další čtyři pak mezi aplikační. S tímto členěním lze souhlasit. S čím však souhlasit nelze je chybějící experimentální část, kde by alespoň stručně byly popsány studované systémy, instrumentace a nástroje kvantově chemických výpočtů. Autor tak práci oponentovi neusnadňuje, veškeré údaje je třeba hledat v jednotlivých publikacích. Vzhledem ke stručnosti výsledkové části pak toto do jisté míry platí i o komentářích výsledků a jejich diskusi. Následuje závěr a výčet použité literatury (128 citací).

Z příložených 8 publikací v mezinárodních impaktovaných časopisech je aspirant uveden jako první autor ve třech případech, jako druhý autor v jedné publikaci. Významnost podílu aspiranta na těchto výsledcích je tedy zřejmá. Zároveň je třeba dodat, že se jedná o publikace v prestižních časopisech, např. *J. Phys. Chem. B* IF = 3,146, *Spectrochim. Acta – A* IF = 2,880 nebo *J. Raman Spectrosc.* IF = 2,879. Kladně hodnotím aspirantův široký tematický záběr a také to, že přispěl články metodického charakteru, které jistě mají potenciál oslovit širší vědeckou komunitu.

**Aktuálnost zvoleného tématu, výsledky disertace a nové poznatky:** Výsledky disertační práce Mgr. Pazderky jsou jednoznačným přínosem oboru a jsem si jist, že poslouží jeho dalšímu rozvoji.

**Zvolené metody a postupy:** Aspirant ke splnění cílů své práce využil odpovídající experimentální a výpočetní nástroje a technické zázemí dostupné nejen na pracovišti školitele, ale i v rámci četných spoluprací, nejen tuzemských, ale i mezinárodních (prof. Nafie, dr. Dukor, prof. Lednev a další). V mnohých studiích též zvolil kombinaci metod, což považuji za velmi užitečné a u složitých systémů i vysoce žádoucí.

**Kvalita zpracování disertace:** Práce je sepsána velmi dobrou angličtinou takřka bez překlepů a formálních chyb. Svým rozsahem patří ke stručnějším, což v některých pasážích (především

v experimentální a výsledkové části, viz výše) motivuje oponenta přečíst i všechny přiložené publikace.

Připomínky mám především k chybějící škále osy  $y$  v Obrázcích 1.3 a 2.8 (str. 8 a 21). Pozitivně naopak hodnotím grafickou stránku práce, korektní užívání citací v textu a u převzatých obrázků a adekvátně obsáhlý seznam literatury.

Přes nespornou kvalitu získaných výsledků se nabízí některé otázky či náměty do diskuse:

- 1) Aspirant při vzniku supramolekulární chiralita proteinových fibril pozoroval výrazné zvýšení signálu VCD. Zároveň konstatuje, že tento jev nebyl prozatím uspokojivě vysvětlen a nabízí možné varianty. Nemohu se tedy nezeptat – 1. byl měřený vzorek pravým roztokem bez náznaku opalescence, precipitace či vzniku gelu?, 2. jak byl vnášen do kyvety?, 3. byla měřena spektra IR a VCD také při rotaci (manuálně vždy například o 90°) kyvety v držáku?
- 2) Autor neuvádí, do jakého časopisu byl zaslán manuskript z přílohy č. 6. Prošel již recenzním řízením?

Závěrem mohu konstatovat, že předložená disertační práce obsahuje původní a uveřejněné výsledky a prokazuje schopnost autora k samostatné tvůrčí práci, o čemž svědčí řada publikací v mezinárodních impaktovaných časopisech. Vyvozené závěry jsou v souladu s obecnými dosud akceptovanými poznatky, výše uvedené připomínky zásadním způsobem nesnižují velmi dobrou úroveň předkládané práce, proto mohu tuto práci **doporučit k probíhající obhajobě**.

V Praze dne 25.8.2018

Vladimír Setnička

Doc. Ing. Vladimír Setnička, Ph.D.  
Ústav analytické chemie  
Vysoká škola chemicko-technologická  
Technická 5  
166 28 Praha 6

Tel: +420 220 445 015  
Fax: +420 220 444 352  
E-mail: [vladimir.setnicka@vscht.cz](mailto:vladimir.setnicka@vscht.cz)