



ÚOCHB AV ČR

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE A BIOCHEMIE
AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY
INSTITUTE OF ORGANIC CHEMISTRY AND BIOCHEMISTRY
ACADEMY OF SCIENCES OF THE CZECH REPUBLIC

Praha, 15. 5. 2019

Posudek školitele

Ricky Nencini přestoupil do mojí skupiny v zimě loňského roku a zároveň s tím zcela změnil téma své diplomové práce. Od studia bílkovin se Ricky přesunul k modelování buněčných membrán. Konkrétně se Ricky zabýval vývojem přesných silových polí pro popis interakce mezi fosfolipidovými dvojrstvami a biologicky relevantními ionty, jak jsou např. sodný a vápenný kationt. Vývoj těchto interakčních potenciálů je umožněn přesnými měřeními nukleární magnetické resonance, spojenými s tzv. konceptem elektrometru. Ten dává do přímé úměry koncentraci jednotlivých iontů a jejich vliv na orientaci hlaviček fosfolipidů v membráně, kterou lze odvodit z měření NMR.

Ricky udělal v tomto směru velký kus práce a díky němu máme dnes k dispozici modely nejvýznamnějších fosfolipidů, které na rozdíl od předcházejících modelů správně popisují interakce s ionty ve vodném roztoku. Výsledky, které Ricky získal spolu s dalšími kolegy ve skupině a externími spolupracovníky, byly nejen úspěšně publikovány v J. Phys. Chem. B, ale také slouží a budou sloužit k přesnému modelování buněčných membrán v naší skupině i jinde. Role Rickiho v tomto projektu byla zcela klíčová - a to jak při vlastním modelování pomocí metod molekulové dynamiky, tak při fitování nových parametrů silových polí.

Závěrem je mi potěšením doporučit pěkně napsanou diplomovou práci mého studenta Ricky Nencini k obhajobě a navrhnout hodnocení "výborně".

Prof. Pavel Jungwirth