


Posudek školitele na diplomovou práci Jiřího Vymětala „Theoretical study of the conformational Behavior and Structural Preference of Amino Acids in Peptides by Metadynamics“

Chování proteinů - základních stavebních prvků živých organismů na subbuněčné úrovni, určuje jejich struktura a interakce v rámci prostředí v němž vykonávají svou funkci. Otázkou je do jaké míry je aminokyselinová sekvence proteinu – tedy jeho primární struktura, unikátní a rozhodující pro plnění dané funkce, souvisí bezprostředně s konformačním chováním aminokyselin ze kterých je protein složen. Toto chování je determinováno jednak bezprostředním okolím aminokyseliny, tedy sousedními aminokyselinami a v určité míře také interakcemi mezi aminokyselinami v sekvenci vzdálenými. Tento sekvenční a strukturální kontext nelze od sebe jednoduše oddělit a naskýtá se tedy otázka, co je oním primárním a determinujícím faktorem při sbalování proteinu do jeho stabilní struktury a nakolik jsou tyto vlivy mezi sebou nezávislé. Cílem předkládané diplomové práce byla analýza 20 biogenních aminokyselin v jejich izolovaném stavu a v kontextu krátkého peptidu metodou metadynamiky a srovnání s chováním aminokyselin v proteinech analýzou struktur z Protein Data Bank.

Musím konstatovat, že práce je jednak svým rozsahem ale i způsobem zpracování jasným důkazem vědecké připravenosti a v některých směrech i vyzrálosti autora. Krok za krokem budovaná metodická konstrukce a neustálá kontrola její spolehlivosti dává diplomové práci plný rozměr vědecké publikace. Ten je také jedním z cílů a dle mého soudu nebude problémem předkládanou práci v per review systému časopisu jako je Protein Science, JPC B či ChemPhysChem publikovat. Výsledky práce ukazují závislost konformačních preferencí aminokyselin jak na prostředí tak i na bezprostředním kontextu a jsou velmi zásadním druhem informace směřující k závěru, že bezprostřední okolí je determinujícím faktorem struktury proteinu spíše než nekovalentní interakce mezi postraními řetězci.

Jako školitel velmi kladně hodnotím seriózní přístup diplomanta k celé práci, jeho píli, spolehlivost a schopnost se neustále sám vzdělávat a ihned aplikovat získané poznatky. To je možné i díky programovacím a technickým schopnostem autora, které jsou bez přehánění na profesionální úrovni. Závěrem musím konstatovat že bylo pro mě potěšením s Jiřím pracovat a doufám, že jeho další směřování ve vědě se bude realizovat na našem oddělení. Práci bez připomínek a bez váhání doporučuji k dalšímu řízení.


RNDr Jiří Vondrášek CSc, školitel