

Posudek na disertační práci a studenta Jiřího Kysilku

Jiří Kysilka nastoupil sva PhD studia v roce 2009 v rámci programu Molekulární modelování nano a biostruktur s cílem spojit ve své disertační práci metodiku pokročilých ab initio výpočtů a studium stability a interakce proteinů pomocí empirických metod a bioinformatických analýz. Toto téma je nesmírně náročné a dá se říct, že od počátku bylo jasné, že výběr problémů ilustrující logiku propojení mezi oběma metodami bude klíčový. Na počátku studia bylo nutné aby JK nejprve zvládnul teoretické základy výpočetní chemie, speciálně metodiku DFT a pokusil se na modelových případech ilustrovat výhody speciální parametrizace DFT/CC a určit obor použití pro biomolekuly, zvláště pak pro proteiny. V tomto ohledu se dá říct, že výsledky uvedené v disertační práci a nepublikované studie skončily tak na půl cesty od zamýšleného cíle, zvláště pak díky netriviálním komplikacím, které korekční schéma DFT/CC přináší s ohledem na použitelnost ve velkých systémech a určité nezkušenosti studenta v oboru. Přesto bych jeho práci v tomto směru hodnotil jako přínosnou i přesto, že se nepodařilo dosáhnout optimálního stavu řešení.

Zhruba ve druhé půli disertace se JK soustředil na problematiku nekovalentních interakcí v proteinech, tentokrát nikoli s ohledem na jejich význam pro vnitřní stabilitu, ale s cílem zmapovat principy protein-protein interakce. Ta se v rámci metodiky, která byla používána v podstatě shodovala s metodikou využitou a již odzkoušenou pro studium stability proteinů samotných. Velká část analýz sebou přinesla potřebu využití strukturně-bioinformatických metod a jejich výsledky zásadním způsobem předznamenaly i výpočetní postupy využívající empirických potenciálů, v současné době nejrozšířenější metodiky pro studium biologických molekul. Toto úsilí bylo korunováno 2 samostatnými pracemi, jedna z nich již publikována v *Journal of Molecular Recognition* a druhá v revidované verzi zaslána k opakovanému recenznímu řízení tamtéž. Dá se říct, že JK na těchto dvou publikacích vědecky dospěl a to nejen z hlediska práce na problému, ale i práce s vědeckým textem a diskuse s oponenty. Druhá z uvedených prací která měla za cíl analyzovat solvatační obal proteinu T4 lysozymu je tak nejen důkazem o systematické práci na problému, ale hlavně kritické práce s výsledky. Přes určitou nezkušenost JK v oblasti bioinformatiky a molekulárního modelování se mu podařilo i s pomocí ostatních kolegů studentů a konzultantů zmíněné oblasti nastudovat a využít těchto znalostí ku prospěchu věci. JK by měl ovšem nadále na sobě tvrdě pracovat pokud bude chtít v tomto oboru uspět, zvláště pak s přihlédnutím k velké kompetitivě která v něm panuje.

Není mým cílem poukazovat na přednosti a nedostatky JK ale rád bych zdůraznil, že od určité doby přesně pochopil na čem závisí efektivita vědecké práce a její aktuálnost a věřím, že i nadále bude rozvíjet své nemalé schopnosti s cílem přinášet závažné výsledky na poli které si pro

svou disertaci vybral. Celkově s přihlédnutím k výsledkům a získaným znalostem JK doporučuji jeho disertační práci k dalšímu řízení.

Kodaň, 21.4.2013