

Univerzita Karlova v Praze
Matematicko-fyzikální fakulta

ZÁZNAM O PRŮBĚHU OBHAJOBY
DISERTAČNÍ PRÁCE

Název práce: Molecular modeling of lipid membranes with fluorescent probes

Jazyk práce: angličtina

Jméno studenta/studentky: RNDr. Miroslava Dékány Fraňová

Studijní program: Fyzika

Studijní obor: Biofyzika, chemická a makromolekulární fyzika

Školitel: RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.

Oponenti: RNDr. Ivan Barvík, Ph.D., FÚ UK

RNDr. Robert Vácha, Ph.D., CEITEC

Členové komise: prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc., předseda, MFF UK, přítomen
prof. RNDr. Josef Štěpánek, DrSc., místopředseda, FÚ UK, přítomen
prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc., MFF UK, nepřítomen
doc. RNDr. Dana Gášková, CSc., FÚ UK, přítomna
doc. RNDr. Otakar Jelínek, CSc., 1. LF UK, přítomen
prof. Mgr. Pavel Jungwirth, DSc., ÚOCHB AV ČR, v.v.i., nepřítomen
RNDr. Jan Krůšek, CSc., FGÚ AV ČR, v.v.i., přítomen
prof. RNDr. Jaromír Plášek, CSc., FÚ UK, přítomen
RNDr. Karel Sigler, DrSc., MBÚ AV ČR, v.v.i., nepřítomen

Datum obhajoby: 7. 7. 2014

Průběh obhajoby:

1. Obhajobu zahájil v 10:31 předseda komise prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc. konstatováním, že všechny formální náležitosti k zahájení obhajoby byly splněny, a představil uchazečku.
2. Školitel RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D. přednesl hodnocení uchazečky RNDr. Miroslavy Dékány Fraňové a předložené dizertační práce s názvem: Molecular modeling of lipid membranes with fluorescent probes. Uchazečka přednesla 30 minutovou prezentaci předkládané práce.
3. Předseda komise představil oponenty, kterými byli jmenováni:

RNDr. Ivan Barvík, Ph.D., FÚ UK

RNDr. Robert Vácha, Ph.D., CEITEC

4. RNDr. Ivan Barvík, Ph.D. přednesl svůj posudek a položil otázky vyplývající z tohoto posudku:
- Byly v prezentovaných trajektoriích zaznamenány přechody DPH sond z jedné vrstvy do druhé? Byla v MD simulacích zaznamenána vzájemná interakce DPH sond lokalizovaných v různých vrstvách tak, jako to bylo následně zaznamenáno pro pyrenové sondy?
 - Existují pro zkoumané sondy výpočty velikosti bariéry volné energie na rozhraní voda-membrána? Byly autorkou práce provedeny či v literatuře prezentovány MD simulace zachycující spontánní proniknutí DPH či pyrenové sondy do membrány?
 - Otázka na další vývoj výzkumu a doporučení provést srovnávací studii se silovým polem CHARMM.
5. RNDr. Robert Vácha, Ph.D. přednesl svůj posudek a položil otázky vyplývající z tohoto posudku:
- Byl tlak aplikován izotropně nebo anizotropně? Byl vyvíjen nějaký tlak nebo napětí v membránové rovině v simulovaných modelech? Jak vše souvisí s provedenými experimenty?
 - Byl vzat v úvahu růst tloušťky membrány s rostoucí koncentrací cholesterolu při posunu DPH od centra dvojvrstvy blíže k vodní fázi?
 - Zahrnutá parametrizace pyrenu má nulové parciální náboje. Je tato parametrizace vhodná pro pyren-pyrenovou interakci? Jak dobře je popsána interakce mezi aromatickými částmi molekul a mohla by tato aproximace vést k nesprávným dimerizačním stupňům?

Oba oponenti byli s odpověďmi uchazečky spokojeni.

6. Předseda komise otevřel diskusi.
- prof. Plášek: Byla zvažována lokalizace (hloubka) cholesterolu pomocí vodíkového můstku směrem k polárním hlavičkám fosfolipidů? Byly na základě vývoje dynamiky a rozvoje do Legendrových polynomů porovnávány modely s výsledky dohasínání v experimentu? Existuje korelace mezi koncentrací cholesterolu a kvalitou rozvoje do Legendrových polynomů?
 - doc. Jelínek pochválil prezentaci a lehce vytknul, že citace v disertační práci jsou pouze z posledních let.
 - RNDr. Krůšek: diskuse ohledně vlivu pyrenů na dimerizaci a membránový potenciál.
 - prof. Štěpánek: diskuse ohledně příčiny a vlivu zvolené teploty (325 K) v prezentovaných modelech.
 - prof. Skála: diskuse týkající se možností zkoumání fázových přechodů pomocí molekulárních simulací.

Uchazečka průběžně odpověděla na všechny předkládané otázky.

7. Předseda konstatoval, že RNDr. Děkány Fraňová náležitě zodpověděla všechny předložené otázky a uzavřel diskusi.

Počet publikací uchazečky: 3

Výsledek hlasování:

Počet členů s právem hlasovacím: 9

Počet přítomných členů: 6

Odevzdáno hlasů kladných: 6

Odevzdáno hlasů neplatných: 0

Odevzdáno hlasů záporných: 0

Výsledek obhajoby: prospěl/a neprospěl/a

Předseda nebo místopředseda komise: prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.