

Oponentský posudek disertační práce **Lady Biedermannové**
nazvané **Nekovalentní interakce aromatických systémů a jejich význam v proteinech a organokatalýze**

Předložená disertační práce, o rozsahu 72 stran a šesti příloh ve formě publikovaných prací a manuskriptů, se věnuje nekovalentním interakcím a jejich úloze v proteinech a v asymetrické organokatalýze. Práce je srozumitelná a navíc čtivá. Obě studovaná témata jsou velmi aktuální a významná, a proto lze zanedbat to, že v jedné disertační práci působí poněkud heterogenně. Úvodní část zmiňuje motivace a dále představuje studované systémy následované členěním celé práce, což čtenáři usnadňuje orientaci v textu. Teoretické postupy shrnuje druhá kapitola podávající přehled od metod neempirických až po metody empirické a zahrnuje i části o interakční energii a popisu solvatačních příspěvků. Následující tři kapitoly se věnují nekovalentním interakcím v proteinech a kapitola šestá pak aromatickým interakcím při organokatalýze.

Práce je doplněna přílohovou částí obsahující separáty čtyř autorčiných prací a dále dvou manuskriptů zaslaných k recenzi. Po obsahové stránce je práce nadstandardním dílem, použité výpočetní metody jsou nejen adekvátní, ale často na hranici nejkvalitnějších dostupných metod v oblasti. Navíc práce obsahuje jen malé množství, většinou odpustitelných, chyb (např. str. 12 – rovnice (2.1) a (2.2), platí za určitých podmínek, navíc bych místo symbolu E v rovnici (2.2) doporučil zavedenější symbol U, s tím, že $U = E + E_{ZPVE}$; str. 19 – van der Waalsův člen v rovnici (2.17) zahrnuje vedle disperze i repulzi, což ostatně ukazuje i rovnice (2.18)). Zmatečně také působí fakt, že v sekci „Appendix“ je u práce „B“ uveden jako časopis *Protein Science*, avšak podle přiloženého separátu jde o časopis *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics*.

K práci mám jedinou otázku:

V práci je zmíněn fakt, že ke stabilitě hydrofobního jádra proteinů významně přispívá enthalpický člen potažmo zejména disperzní interakce uvnitř hydrofobního jádra. Toto tvrzení jistě ob stojí ve světě plynné fáze, tedy například v aplikacích jako je hmotnostní spektrometrie, avšak v oblasti stabilizace proteinů v nativním prostředí se mi zdá toto tvrzení na základě předložených autorčiných prací nedostatečně podloženo. Domnívám se totiž, že podobné tvrzení by bylo třeba opřít o srovnání dvou jasných stavů. Jedním by byla nativní a sbalená konformace proteinu a tím druhým soubor nesbalených forem téhož proteinu a to včetně zahrnutí vodného prostředí. Jaký je současný názor autorky na tvrzení publikovaná v roce 2005?

Předložená disertační práce obsahuje cenné a kvalitní výsledky, které ostatně již jednou prošly náročným recenzním řízením v redakcích velmi prestižních odborných časopisů.

Práci doporučuji bez výhrad k obhajobě.

doc. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
Katedra fyzikální chemie
Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci
Tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
tel. +420 58 563 4756
fax +420 58 563 4756
e-mail: otyepka@aix.upol.cz