

Diplomová práce Veroniky Juráskové „**Influence of phosphorylation on the conformation of peptides and proteins**“

Diplomová práce Veroniky Juráskové je výsledkem soustředěného úsilí a vysokého pracovního nasazení předkladatelky a ve své podstatě zahrnuje strukturně-výpočetní pohled na problematiku fosforylace proteinů. Tento jev je zkoumán na modelových systémech, kterými jsou v tomto konkrétním případě dipeptidy, pentapeptidy a dekapentapeptidy, a kromě nich také na proteinech, jejichž struktury získané roentgenovou difrakcí nebo NMR existují ve strukturní databázi PDB. Práce je důkazem zásadního vlivu fosforylace – tedy posttranslační modifikace, na strukturní preference peptidového řetězce, jejichž změny hrají zjevně důležitou roli v procesech interakce a zprostředkovaně tedy v buněčných signalizacích. Práce zároveň představuje použití výpočetních metod založených na empirických potenciálech - převážně tedy molekulové dynamiky a metadynamiky, která se ukazuje jako vhodná metoda při popisu komplexních povrchů Gibbsovy volné energie u dobře definovaných systémů. To, co z práce samotné vyplývá jako unikátní výsledek vědeckého bádání, jsou popsány změny konformačních stavů v závislosti na fosforylaci hlavních aminokyselin podléhajících této modifikaci – Serinu, Threoninu a Tyrosinu. Ukazuje se, že jasná změna konformačního stavu hlavního řetězce se projevuje pouze u Serinu a Threoninu, tedy aminokyselin s krátkým postranním řetězcem, zatímco u Tyrosinu se podobné změny nevyskytují. Výsledek diplomové práce je základem pro další práci na tématu a přispívá k objasnění na základě fyzikálně založených metod.

Veronika Jurásková je pracovitá a iniciativní studentka s vlastním názorem a bylo mi potěšením ji vést. Množství provedených studií a jejich vyhodnocení je enormní a výsledky jsou pečlivě kontrolovány. Její rozhled jak z hlediska výpočetní chemie ale i biochemie a strukturní molekulární biologie je nadprůměrný a dovoluje jí přemýšlet v širším rámci než jen vymezeném definicí zadání. Je také třeba říci, že zkušenosti, které během své diplomové práce Veronika Jurásková nasbírala, se v její další vědecké kariéře zhodnotí. Hodnotím předkládanou diplomovou práci jako výbornou a stejně tak i práci Veroniky Juráskové v rámci Mgr. studia.