

Posudek na diplomovou práci Mariána Grockého.

Diplomová práce Mariána Grockého s názvem „Měření C-13 NMR relaxací karbonylových skupin v proteinech“ byla vypracována na Katedře nízkých teplot, Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy v Praze. Je sepsána v českém jazyce na 73 stranách textu, včetně příloh. Formálně je členěna na úvod, teoretickou a experimentální část, závěr, literaturu a přílohy, přičemž experimentální část obsahuje podkapitoly materiál a metody a výsledky a diskuze.

Autor se zabývá využitím relaxačních vlastností ^{13}C karbonylových skupin pro zmapování dynamických vlastností matrixového proteinu Mason-Pfizerova opičího viru a jeho fyziologicky relevantního mutantu R55F. V diplomové práci je výborným způsobem zpracována úvodní část, kde je jasným a srozumitelným způsobem vysvětlen zejména fenomén relaxací v NMR spektroskopii a jejich vztah k dynamickým vlastnostem proteinů. Měření relaxačních vlastností ^{13}C jader karbonylových skupin představuje další metodu k zmapování pohybů páteře proteinů. Na rozdíl od ^{15}N jader je možné monitorovat poněkud jiné frekvence pohybů vzhledem k rozdílným rezonančním frekvencím obou jader. Autorovi se podařilo zoptimalizovat pulsní sekvenci pro měření podélných i příčných relaxací a naměřit data na vzorcích obou proteinů. Kvalita dat na vzorku mutantu však byla negativně ovlivněna jeho postupující degradací, což vedlo k tomu, že tato data nebylo možné dále použít. Dále se podařilo zjistit, že T_1 relaxace jsou mnohem horší kvality, než T_2 z důvodů menšího odstupu signálu od šumu.

Podle mého názoru se jedná o kvalitní diplomovou práci, jejímž vypracováním prokazuje autor jednak svojí odvalu pustit se do neprobádané oblasti studia dynamického chování proteinů pomocí měření relaxačních vlastností ^{13}C karbonylových skupin a jednak svoji kompetenci řešit takováto, ne zrovna jednoduchá témata. V práci jsem našel pár nepřesností:

- str. 7: v rovnici 20 je dipól-dipólová konstanta označena jako b_{jk} , má být DCC_{jk}
- str. 18, ř. 2: místo podélná relaxace má být příčná relaxace
- str. 21: kvarterní struktura proteinů je vzájemné uspořádání proteinových domén
- str. 21: Mason-Pfizerův opičí virus nepatří do skupiny lentivirů, ale do D-typu retrovirů
- str. 22, ř. 5: pořadí genů retrovirů je *gag*, *pol*, *env*, v případě M-PMV ještě přistupuje gen *pro* (*gag*, *pro*, *pol*, *env*)

- str. 24, ř. 14: CTRS signál je lokalizovaný mezi Pro43 až Gly60
- str. 29, ř. 7: místo preparační fáze by bylo asi vhodnější použít výraz přípravná fáze
- str. 30, ř. 5: výraz „Roli 180° pulsu hraje...“ bych nahradil např. „180° puls má speciální tvar, zvaný reburp“
- str. 30, ř. 15: výraz „...pomocí semi-constant timu“ je laboratorní slang, ale protože nemá český ekvivalent, nahradil bych jej např. výrazem „...byl realizován metodou nazývanou „semi-constant time“, kdy anglický výraz je v uvozovkách a rozhodně bych jej neskloňoval
- str. 31: v případě vícekanálové pulsní sekvence bych z důvodů přehlednosti doporučoval rozdělit ^{13}C stopu na ^{13}CO a $^{13}\text{C}_\alpha$
- str. 33, ř. 4: výraz „Počty ve spektrech nalezených reziduí“ není přesný, v NMR spektrech nelze nalézt žádná rezidua, nahradil bych jej výrazem „Počty ve spektrech nalezených signálů reziduí“
- str. 34, ř. 3: peak má český ekvivalent pík
- str. 35: Název kapitoly 3.2.1. by asi měl být ^{15}N relaxace přirozené formy matrixového proteinu M-PMV
- str. 38: Název kapitoly 3.2.2., viz předchozí bod
- str. 54: Zvýšení hodnoty parametru S^2 v oblasti aminokyseliny 100 v molekule mutantu R55F je pravděpodobně artefakt, neboť oba proteiny mají prokazatelně flexibilní konce

Protože se však ve všech případech jedná jen o nepřesná vyjádření a nikoliv zásadní chyby nebo nesrovnalosti, tyto mé připomínky nikterak nesnižují kvalitu diplomové práce. Hodnotím jí proto stupněm výborný a doporučuji jí k obhajobě.

V Praze, dne 18.5. 2007



Ing. Richard H