

„Homologní a energetické modelování proteinů ve spojení s molekulární dynamikou a vibrační spektroskopií“

Předložená bakalářská práce se zabývá aplikací moderních výpočetních a experimentálních metod na studium proteinů kyslík vyvíjejícího komplexu fotosystému II. Cílem této práce bylo sestavit homologní modely vnějších proteinů fotosystému II pro hrách a špenát, určit vazebná místa pro vápenatý iont a potvrdit nezbytnost určitých aminokyselin pro stabilitu struktury proteinů PsbQ a PsbP.

Práce v celkovém rozsahu 35 stran je standardně členěna na část úvodní, použité metody, výsledky, diskuse, použitou literaturu, přehled publikovaných prací autorky a jedna příložená publikace zabývající se výzkumem proteinu PsbQ.

Bakalářská práce je napsána poměrně srozumitelně i přes trochu zbytečné formální nedostatky, jako například nedostatečnou čitelnost obrázků v úvodní části, překlepy, občasné chybějící objasnění zkratk, výrazů a metod v úvodní části práce, nepřesnou formulaci Ramachandranova diagramu na str.7, apod.

Význam bakalářské práce spatřuji v úspěšné aplikaci širokého spektra výpočetních i experimentálních metod pro výzkum proteinů, jmenovitě metody homologního modelování, energetické optimalizace a molekulové dynamiky, fylogenetické analýzy proteinových struktur a experimentální metody FTIR a Ramanovu spektroskopii. V přehledu publikační činnosti je uvedeno, že studentka je hlavní autorkou jedné a spoluautorkou tří publikací uveřejněných v mezinárodních recenzovaných časopisech, a spolupracuje i na mezinárodních výzkumných projektech. Lze tak konstatovat, že studentka obohatila výzkum na pracovišti, jež se dlouhodobě zabývá výzkumem fotosyntézy, o nové teoretické a experimentální přístupy a prokázala schopnost samostatně pracovat na vědecko-výzkumném projektu.

Bakalářskou práci hodnotím známkou „výborně“ a doporučuji k obhajobě pro získání bakalářského titulu.

Pro obhajobu bakalářské práce si dovolím vznést následující doplňující dotazy:

1. Z jakého důvodu bylo pro dynamickou studii použito silové pole Gromacs a zda byla provedena dodatečná parametrizace pro případné nestandardní vazby? Dále pak prosím o zdůvodnění oprávněnosti použít poměrně velkou hodnotu časového kroku 5fs, jež může výrazně ovlivnit přesnost druhé derivace polohového vektoru neboli silového pole pro popis nevazebných interakcí a vodíkových vazeb, byla provedena srovnávací studie s menším časovým krokem?
2. Jaká je časová a hardware náročnost uvedených výpočetních metod, především u dynamické studie?
3. Pro určení prvků sekundární struktury byly použity standardní experimentální metody FTIR a Ramanova spektroskopie, uvažujete i o aplikaci metod cirkulárního dichroismu a nukleární magnetické rezonance?

V Českých Budějovicích 2.června 2006

Mgr. Michal Kutý, Ph.D.
Ústav fyzikální biologie JU v ČB

