



Posudek šolitele bakalářské diplomové práce Žofie Sovové „Homologní a energetické modelování proteinů ve spojení s molekulární dynamikou a vibrační spektroskopií“

Bakalářská práce Žofie Sovové se zabývá studiem proteinů kyslík vyvíjejících komplexů fotosystému II metodami molekulárního modelování. Fotosystém II je pigment proteinový komplex thylakoidní membrány chloroplastů řas a vyšších rostlin a sinic. Jeho funkcí je využití energie slunečního záření ke tvorbě elektrochemického potenciálu na membráně a přenosu elektronu dále na redukční ekvivalenty. Při tomto procesu dochází k rozkladu vody a tvorbě molekulárního kyslíku - oxygenní fotosyntéza. Význam komplexu fotosystému II je umocněn i skutečností, že na něm vzniká veškerý kyslík na naší planetě potřebný k životu.

Vznik oxygenní fotosyntézy byl pravděpodobně podmíněn vznikem syntézy chlorofylu. Předchůdce chlorofylu - bakteriochlorofyl totiž není schopen při své oxidaci dosáhnout tak vysokého redoxního potenciálu, který by mohl štěpit vodu. Vedle chlorofylu je ke štěpení kyslíku nutná i přítomnost atomů manganu na fotosystému II a kyslík vyvíjejícího komplexu těsně sousedícího s fotosystémem II.

Proteiny kyslík vyvíjejícího komplexu fotosystému II hrají důležitou roli pro nastolení optimálních podmínek pro štěpení vody při procesu fotosyntézy. Jedná se o extramembránové proteiny z nichž pouze 33 kDa protein je společný všem kyslík vyvíjejícím organismům. Ostatní dva proteiny jsou různé u sinic a ruduch a u vyšších rostlin a zelených řas. 33 kDa protein je kódován genem *psbO* a je velmi konzervovaný (45%) mezi organismy (Tohri et al 2001). Bylo prokázáno, že je možné tento protein zaměnit jak mezi špenátem a *Arabidopsis thaliana* tak i mezi sinicemi a vyššími rostlinami nebo ruduchami a vyššími rostlinami. Vyšší rostliny a řasy obsahují vedle tohoto proteinu ještě dva proteiny s molekulovou hmotností 23 a 16 kDa kódované geny *psbP* a *psbQ*. Tyto proteiny se účastní vazby vápenatých a chloridových iontů, které jsou potřebné pro optimální funkci tohoto komplexu. V komplexu vyvíjejícím kyslík jsou tyto proteiny v poměru 1:1:1. Jeden kyslík vyvíjející komplex se váže na jeden komplex fotosystému II.

Ve své práci Žofie Sovová kladla hlavní důraz na zvládnutí metody homologního modelování proteinů, energetické optimalizace proteinových struktur a sledování dynamiky a dynamické interakce proteinů i jejich komplexů metodou molekulární dynamiky. Částečně se práce zabývá i metodou fylogenetické analýzy vnějších proteinů fotosystému II. V případě *PsbQ* ze špenátu byl zároveň připraven rekombinantní protein v *E. Coli.*, a měřen pomocí vibrační spektroskopie konkrétně FTIR a Ramanovou spektroskopií. Následovala konfrontace informace obsažených v těchto spektrech se získaným teoretickým modelem *PsbQ* ze špenátu. Tyto výsledky byly úspěšně publikovány v renomovaném časopise s vysokým impakt faktorem "Biochemical and Biophysical Research Communication". Celá práce je v souladu s dlouhodobým zaměřením naší výzkumné skupiny v oblasti fotosyntézy.

Žofie Sovová byla během své práce zapojena i do naší dlouhodobé mezinárodní spolupráce v této oblasti výzkumu. Tři měsíce úzce spolupracovala se studentem Princetonské University Michal Green na molekulární dynamice v Gromacsu a krystalové struktury PsbQ konsultovala s Juanem B. Arrelanem ze Salamancy, který ji dal k dispozici koordináty z rentgenové difrakce.

Kvalita a množství výsledků, široké spektrum používaných metod a publikační aktivita (4 recenzované publikace, jednou první autorka, 3krát impakt faktor vyšší než 3) svěčí o tom, že Žofie Sovová patří k nejlepším absolventům bakalářského studia. Žofie Sovová byla celé tři roky aktivním a zapáleným členem našeho týmu a vedla i samostatně projekty v rámci letních škol biofyziky.

Předloženou práci s radostí doporučuji k obhajobě pro získání bakalářského titulu.

v Nových Hradech, 2. 6. 2006



RNDr. Rüdiger H. Ettrich, PhD
Ústav systémové biologie a ekologie AVČR
Ústav fyzikální biologie JU