

Posudek oponenta habilitační práce

VŠCHT Praha

Fakulta Fakulta chemicko-inženýrská
Habilitační obor Fyzikální chemie

Uchazeč RNDr. Michal H. Kolář, Ph.D.
Pracoviště Ústav fyzikální chemie, VŠCHT Praha
Habilitační práce Atomistické počítačové simulace ribozomu

Oponent doc. RNDr. Radka Svobodová, Ph.D.
Pracoviště Národní centrum pro výzkum biomolekul,
Masarykova Univerzita, Brno

Text posudku

Je mi potěšením poskytnout oponentský posudek na habilitační práci „Atomistické počítačové simulace ribozomu“, jejímž autorem je Dr. Michal Kolář. Základem práce je 5 článků, z nichž 4 vyšly v impaktovaných zahraničních časopisech, patřících ve svém oboru do prvního kvartilu. Dr. Kolář má klíčový podíl na vzniku těchto článků.

Habilitační práce se zabývá jednou z velkých výzev současného teoretického chemického výzkumu – molekulárně dynamickými (MD) simulacemi molekul ribozomů v atomickém rozlišení. Ribozomy jsou nejen velmi zajímavé a biologicky důležité molekuly, ale vzhledem ke své velikosti a heterogenitě představují extrémně obtížný objekt pro MD simulace. Dr. Kolář v rámci své práce přijímá tuto výzvu, provádí na molekulách ribozomů úspěšně sérii MD simulací a na základě jejich analýz publikuje originální výsledky, přínosné pro vědeckou komunitu. V poslední části práce rovněž se popisuje projekty, které má rozpracované, čímž ukazuje, že má propracovanou vizi dalších směrů, jakými se jeho výzkum bude vyvíjet.

Text práce je vhodně strukturován a je po textové i grafické stránce kvalitní. Překvapivě je práce psána v češtině, což autor úspěšně vysvětluje chybějícími českými studijními materiály ohledně MD simulací ribozomů. Práce je srozumitelná, příjemně se čte a uvádí postupně do příslušné tematiky. K textu práce mám pár drobných výhrad, konkrétně:

- V rámci textu by bylo možno zlepšit jeho typologické provedení. Například výskyt „sirotků“ na stranách 9 (text „Obr. 2.2.“), 20 (text „málo fluktuují...“) a 21 (text „(Obr. 2.5).“). Nebo fakt, že standardní citování pomocí „[]“ je někdy narušeno citováním pomocí „Ref.“ (např. „Ref. 58–60.“, „Ref. 73“). V referencích by pak bylo užitečné psát názvy jednotlivých článků.
- Jazyk kolísá mezi odborným a populárně vědeckým. Bylo by vhodnější držet se odborné formy a fráze typu „konkrétní algoritmy nechávám až na pár výjimek troufale stranou“ raději troufale vynechat.
- V určitých místech by bylo vhodné doplnit podrobnější informace – např. v teoretické části by pomohl obrázek ribozomu s vyznačeným A místem a P místem. Tento obrázek se vyskytuje až později ve výsledkové části.
- V rámci závěru bych spíše než obecnou úvahu očekávala informativnější souhrn provedeného výzkumu.

Celkově ale hodnotím práci jako zdařilou a uvědomuji si její vědecký i pedagogický

potenciál. Kvalitu práce podtrhují nejen úspěšně provedené náročné simulace, ale i fakt, že jednotlivé zkoumané aspekty vzájemně souvisejí a doplňují dostupné informace z oblasti dynamiky ribozomů.

Rovněž oceňuji vysoké scientometrické hodnoty Dr. Koláře. Je také velmi sympatické, že autorův článek [82], který byl v době odevzdávání habilitační práce ještě v recenzním řízení, je nyní již přijat a publikován. Dále bych chtěla vyzdvihnout fakt, že Dr. Kolář je intenzivně zapojen do výuky a vedení studentů (např. tři obhájené disertační práce pod jeho vedením) a také do aktivit v oblasti popularizace vědy.

Dotazy oponenta k obhajobě habilitační práce

1. Jakým způsobem ukládáte data, která v rámci MD simulací vyprodukujete? Existuje nějaký repozitář, shromažďující MD simulace ribozomů od různých výzkumných skupin? Případně plánuje něco takového vaše výzkumná komunita vybudovat?

2. Ve své práci zmiňujete možnosti využití AlphaFoldu pro výzkum ribozomů. Lze již pomocí AlphaFoldu modelovat ribozom včetně RNA? Případně mohl byste podrobněji ukázat, jak lze AlphaFold pro Váš výzkum využít a jaká jsou jeho omezení?

3. Jak jste byli spokojeni s využitím DSSP? Vyhovovala Vám tato metodika? Nebo jste narazili na nějaké problémy případně limitace?

4. V úvodu píšete: "Proteinů o sekvenční délce 100 reziduí teoreticky existuje 10^{130} . Pouze malé množství z nich se ale v mikrosvětě živých organismech skutečně nachází." Mohl byste toto popsat konkrétněji? Proč je teoretické množství těchto proteinů takovéto, jak malé množství uvedených proteinů se vyskytuje v živých organismech, jak je tomu u delších proteinů?

Závěr

Habilitační práce Dr. Koláře „Atomistické počítačové simulace ribozomu“ **splňuje** požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie a doporučuji ji k habilitačnímu řízení.

Brno, dne 21. 2. 2023

doc. RNDr. Radka Svobodová, Ph.D.