

Oponentský posudek disertační práce Ing. Aleny Kolaříkové

Název: Struktura, dynamika a interakce substituovaných molekul hyaluronanu ve směsných rozpouštědlech

Školitel: Doc. RNDr. Marek Ingr, Ph.D.

Oponent: prof. Mgr. Marek Koutný, Ph.D.

Předložená disertační práce má klasickou strukturu, její rozsah je dostatečný a odpovídá očekávání od tohoto typu práce. Lze ocenit, že celá práce je tematicky velmi kompaktní a jednotlivé části spolu souvisí a navazují na sebe. Z doložených publikovaných prací je také možno sledovat časovou posloupnost prací a ocenit systematickост celého přístupu.

Literární rešerše, která tvoří první část práce je zpracována dobře. V celé práci je použito více než obvyklé množství literatury a její využití pro ilustraci dosavadních poznatků o struktuře a chování hyaluronanu je velmi dobré úrovní. Nerozumím proč pro ilustraci struktury hyaluronanu byl zvolen snad nejméně hezký a přehledný obrázek. Dále mi vadilo, že popisované struktury a procesy nebyly ilustrovány obrázky z literatury (např. strany 16 a 19). Na straně 23 se mluví o tom, že nejčastějším místem modifikace je karboxylová skupina, ale související obrázek právě takovou modifikaci neobsahuje. Celkově je ale literární část napsána opravdu hezky a tvoří velmi hodnotný úvod práce.

Část opisující použité metody je překvapivě popisná a v celku pochopitelně se výrazně liší od experimentálních prací uskutečňovaných v laboratoři. Jednotlivé výpočtové postupy, metoda a software jsou velmi a hezky a nekomplikovaně popsány. Mohu konstatovat, že podobný text může být velmi cenný jako úvod do problematiky pro případné studenty, kteří by chtěli v této tématice pokračovat.

Výsledková část je napsána velmi systematicky, jednotlivé experimenty na sebe navazují, jsou logicky seřazeny. Každý experiment je vysvětlen, především s ohledem na jeho motivaci a následně je popsáno jeho provedení a jsou diskutovány výsledky. Chválím především dobře provedenou diskuzi, která je velice dobře srozumitelná a je také podpořena citací vhodné literatury. Obrázky, které jsou zde určitě velmi důležité pro pochopení celé problematiky, jsou velmi ilustrativní. V některých případech bych nicméně ocenil (např. P3), kdyby byly popisnější

texty k obrázkům a byly v nich třeba i opakovaně vysvětleny použité zkratky. Pomohlo by mi to lépe se v obrázku orientovat bez dalšího hledání v textu samotném.

Závěr práce je poté poměrně stručný a pouze rekapituluje vybrané klíčové zjištěné strukturní prvky.

V průběhu řešení a s využitím uvedených výsledků byly publikovány čtyři práce ve velmi prestižních vědeckých časopisech, což lze hodnotit jedinečně jako excelentní výsledek a důkaz relevance a kvality získaných závěrů.

Celkově mohu konstatovat, že práce má velmi dobrou úroveň vědeckou i co se týká jejího formálního zpracování. Disertační práce Ing. Aleny Kolaříkové splňuje požadavky na ni kladené, studentka prokázala tvůrčí schopnosti v dané oblasti výzkumu a doporučuji ji k obhajobě.

Do diskuse při obhajobě práce mám následující dotazy:

Můžete naznačit, jak může vaše práce přispět k praktickým aplikacím HA v oblasti léčivých přípravků, v kosmetice, případně v dalších oblastech?

Je možno očekávat nějaké zapojení umělé inteligence v oblasti modelování molekul tak, jak se to stalo v případě předpovědi konformace proteinů?

Na straně 20 je pasáž, které jsem nerozuměl, nebo obsahuje chybu. Můžete prosím rekapitulovat interakci HA s ionty Ca^{2+} vs. Mg^{2+} , a Na^+ vs. K^+ s důrazem na rozdíly v chování těchto iontů vůči HA?