

Posudek oponenta disertační práce

Student	Mgr. Martin Šrejber
Disertační práce (název)	Modelování biologických membrán
Oponent	doc. RNDr. Radka Svobodová, Ph.D.
Pracoviště oponenta	Národní centrum pro výzkum biomolekul

Ve své disertační práci se Mgr. Šrejber zabývá výzkumem biologických membrán pomocí *in silico* metod. Konkrétně v rámci své práce realizuje pět projektů, zaměřených na toto téma. V prvním projektu se zabývá vývojem databáze MolMeDB, která shromažďuje informace o interakcích mezi molekulami a membránami. Druhý projekt pak zkoumá průchod imunosupresiva cyklosporinu A přes různé biologické membrány. V rámci třetího projektu se zaměřuje na vývoj a validaci výpočetní metodiky pro predikci optimálních podmínek pro liposomální enkapsulaci a tepelně řízené uvolňování bioaktivních látek. Čtvrtý projekt studuje vliv složení membrány na chování mitochondriálního enzymu P450 CYP11A1. Poslední projekt se pak zabývá výzkumem chování enzymu CPR a jeho interakcemi s cytochromem P450 CYP3A4.

Disertační práce je typografického, grafického i jazykového hlediska kvalitní. V textu práce jsem našla jen drobné nedostatky, např.:

- Český překlad abstraktu v rámci bibliografických informací obsahuje některé tvary, přeložené jen částečně (např. „Unikátní vlastností biomembrán je jejich selektivní permeability“).
- Text občas obsahuje typografické nedostatky, např. předložky „v“ na konci řádku (str. 66), nejednotný styl nadpisů kapitol (většinou první velké písmeno, ale někdy kapitálky), apod.
- U některých obrázků (např. Fig. 1, 14, 15 a 16) by bylo vhodné zvolit větší velikost, v současné velikosti jsou v nich špatně čitelné popisky.

Práce využívá klasické členění textu (Úvod, Teorie, Výsledky, Závěr), jen některé části nazývá netypicky (např. místo Úvodu využívá název Motivace). Velmi bych ocenila, kdyby bylo toto transparentní členění využito i u kapitol, popisujících jednotlivé projekty. Pak by bylo možno snadněji odlišit, na čem autor staví a jaké jsou jeho vlastní přínosy.

Na práci bych chtěla zdůraznit a kladně ocenit následující:

- Mgr. Šrejber se zabývá velmi aktuální a důležitou oblastí výzkumu biologických membrán a studuje je pomocí *in silico* metod v rámci pěti organicky propojených projektů. Oceňuji komplexní a dobře definovaný vědecký záměr jeho práce.
- Disertační práce je postavena na třech vědeckých člancích, z nichž u dvou je pan Šrejber prvním autorem. Navíc je autorem čtyř článků, které s jeho disertační prací nesouvisí. Publikační aktivita pana Šrejbera je tedy vysoká.
- Velmi oceňuji fakt, že autor využil pro své analýzy širší škálu různých *in silico* metod, z nichž aplikace každé vyžaduje hlubokou expertízu.

- Pečlivý a podrobný popis struktury biomembrán a jejich interakcí je užitečný pro čtenáře, kteří potřebují do této problematiky proniknout.

Autora bych se chtěla zeptat na následující otázky:

- Mohl byste popsat výpočetní náročnost vaší práce? Kolik MD simulací jste realizoval a jaké množství hodin výpočetního času jste v rámci nich využil? (stačí odhad) A kolik hodin výpočetního času jste využil pro kvantově mechanické výpočty a aplikaci dalších *in silico* metodik?
- Mohl byste u všech pěti projektů, které v rámci své disertační práce uvádíte, popsat jakou roli jste v nich měl a jaké úkoly jste realizoval?
- V práci uvádíte i dva projekty, u nichž publikaci teprve připravujete. V jaké fázi je příprava uvedených publikací?

Na závěr bych chtěla říci, že Mgr. Šrejber plně prokázal schopnost samostatné práce i zpracování výsledků do podoby publikací v impaktovaných vědeckých časopisech. Jeho práci proto jednoznačně doporučuji k obhajobě.

Datum 29.8.2023

.....
Podpis