



V Olomouci 25. září 2018

### **Posudek habilitační práce RNDr. Jiřího Vondráška, CSc.**

Habilitační práce RNDr. Jiřího Vondráška, CSc. nadepsaná „Intramolekulární stabilizace proteinů pohledem výpočetních metod“ pojednává o systematickém teoretickém studiu fyzikálně-chemické podstaty stabilizace nativní konformace proteinů. Svým rozsahem pak sahá od detailní analýzy fyzikálně chemické podstaty jednotlivých interakcí aminokyselin uvnitř globulárních proteinů, přes testování schopností metod kvantové chemie popsat tyto interakce až po bioinformatické studie, které jsou v konečném důsledku aplikovány na vytvoření bioinformatického nástroje sloužícího jako pomůcka pro racionální design proteinů. Práce se opírá o 16 studií publikovaných v kvalitních mezinárodních časopisech v letech 2005-2017, v nichž je dr. Vondrášek prvním a/nebo korespondujícím autorem. Tyto studie tvoří jakési reprezentativní jádro jinak mnohem bohatší publikační činnosti dr. Vondráška. Celá práce je doplněna stručným, ale informačně dostatečně bohatým, komentářem, uvádějící publikované studie do vzájemného kontextu a shrnující základní teze celé práce. Tento komentář se sám o sobě velmi dobře čte a elegantně tak představuje celou šíři práce od zkoumání fundamentální podstaty interakcí mezi aminokyselinami až k aplikacím těchto netriviálních poznatků při tvorbě bioinformatických nástrojů, což lze bezesporu připsat jak dobrým pedagogickým předpokladům, tak vědeckému nadhledu kandidáta.

Jak práce samotná, tak soubor publikační činnosti dr. Vondráška je velmi koherentní, což dokládá, že se dr. Vondrášek systematicky věnuje teoretickému studiu stabilizace proteinů, v němž postupně posouval svůj výzkum od studia základních fundamentálních principů interakcí aminokyselin uvnitř globulárních proteinů až k bioinformatickým studiím, které lze využít např. pro racionální design proteinů či drug design. Výsledky prezentované v této habilitační práci jsou tak významným přínosem jak pro oblast teoretické chemie tak oblast bioinformatiky a jejich aktuálnost je nesporná.

Odbornou kvalitu předložených prací není třeba hodnotit, neboť ty již prošly kvalifikovanou recenzí několika desítek recenzentů a velmi přísnými recenzními řízeními. Za pozornost však bezesporu stojí, že tyto práce jsou dobře viditelné v mezinárodní komunitě a jejich ohlas je jasně dokumentovatelný jejich vysokou citovaností. Dr. Vondrášek je v mezinárodní komunitě jednoznačně a dlouhodobě vnímán jako významný odborník na oblast teoretické chemie a bioinformatiky. To lze např. dokumentovat na faktu, že dr. Vondrášek je zakladatelem a vedoucím české buňky bioinformatického projektu Elixir.



Kromě vědecko-výzkumné činnosti dr. Vondráška mohu ocenit i jeho pedagogickou činnost. Dr. Vondrášek dlouhodobě přednáší na Univerzitě Karlově, kde pod jeho vedením úspěšně obhájilo svou disertační práci 6 studentů. Krom toho dr. Vondrášek přednášel i na mé alma mater tj. Univerzitě Palackého, kde jsem měl možnost před několika lety navštívit jeho přednášky a mohu tudíž zodpovědně prohlásit, že jeho pedagogické schopnosti plně vyhovují či lépe řečeno předčí požadavky kladené na kandidáta v habilitačním řízení.

V rámci širší rozpravy bych byl rád, kdyby se kandidát šířeji vyjádřil, jakým směrem plánuje směřovat výzkum ve své skupině. Konkrétněji, zda se plánuje nadále věnovat spíše projektům na poli bioinformatiky nebo si plánuje udržet synergii přesných kvantově chemických výpočtů a bioinformatiky.

Závěrem bych rád shrnul, že dr. Vondrášek je významným odborníkem v oblasti teoretické chemie a bioinformatiky a bezpochyby také velmi schopným pedagogem. Dále bych rád konstatoval, že předložená práce splňuje všechny náležitosti a požadavky kladené na habilitační práce a doporučuji ji bezvýhradně k dalšímu řízení.

doc. Mgr. Pavel Banáš, Ph.D.