



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

Habilitační práce RNDr. Jiřího Vondráška, CSc. se věnuje použití pokročilých výpočetních metod pro stabilizaci globulárních proteinů. Souhrnná analýza interakcí v proteinech v různých prostředích umožňuje robustní statistickou analýzu a kvantitativní predikci důležitosti jednotlivých aminokyselinových zbytků pro strukturu a potažmo funkci proteinů. RNDr. Vondrášek a jeho tým popsal důležitost hydrofobního jádra pro stabilitu proteinů a na ilustrativních příkladech dokladoval vliv mutací na (ne)stabilitu proteinových variant s mutacemi cílenými do tohoto jádra. Významným výstupem výzkumu RNDr. Vondráška bylo zjištění, že dostupná empirická silová pole popisují interakce mezi aminokyselinovými zbytky s dostatečnou přesností, aby byly použitelné pro odhad vlivu mutací na stabilitu a počítačový *de novo* design proteinů pro biotechnologické a terapeutické aplikace. Metoda rychlého výpočtu intramolekulárních interakcí byla validována predikcí mezofilní varianty proteinu rubredoxinu a implementována do webové aplikace INTAA, která zpřístupňuje výpočet interakčních energií v proteinech a protein-DNA komplexech široké uživatelské komunitě.

Habilitační práce se sestává ze 40-ti stran úvodního textu a 16-ti klíčových původních prací, které RNDr. Vondrášek a jeho tým publikovali v průběhu posledních třinácti let. Články byly zveřejněny v etablovaných vědeckých časopisech, například *The Journal of American Chemical Society*, *Journal of Physical Chemistry*, *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics* a *Nucleic Acids Research*. Z bibliografické analýzy Web of Science je zřejmé, že RNDr. Vondrášek od roku 1994 publikoval 117 původních a souhrnných článků, které byly citovány 3022x (s vyloučenými autocitacemi) ve 2806 člancích, s úctyhodným průměrným počtem 27 citací na článek. Nejcitovanější prací Dr. Vondráška je review věnované počítačovému designu inhibitorů HIV-1 proteasy publikované v *Annual Review of Biophysics and Biomolecular Structure* (s 495 citacemi), společně se školitelem Dr. Alexanderem Wlodawerem. RNDr. Vondrášek prokázal schopnost navázat kvalitní mezinárodní spolupráci s řadou významných vědeckých osobností, mj. Dr. Petterem Lyngstaadsem, Dr. Valerií Daggettovou a Dr. Michaellem Olivebergem. Kromě vědecké a školitelské činnosti se RNDr. Vondrášek dlouhodobě věnuje i práci pro vědeckou komunitu. Každé dva roky organizuje vědecky velmi kvalitně obsazené setkání Protein Prague Spring. RNDr. Vondrášek je rovněž jedním z hlavních zakladatelů a koordinátorů českého bioinformatického klastru ELIXIR, který vytváří a udržuje bioinformatické nástroje a databáze vyvíjené v České republice. Tato aktivita pomáhá mnoha bioinformatikům působícím v České republice, ale i zahraničním vědcům, kteří díky ELIXIRu mohou nástroje a databáze využívat k jejich práci.

**Závěrem konstatuji, že habilitační práce RNDr. Vondráška kvalitou i rozsahem splňuje kritéria pro udělení akademické hodnosti docent a rád ji doporučuji k obhajobě.**

Prof. Mgr. Jiří Damborský, Dr.

V Brně dne 16. září 2018

