

Bírálóbizottság értékelése

Dr. Gáspári Zoltán MTA doktori értekezésében olyan módszertani és alkalmazott bioinformatikai kutatásokat mutat be, amelyek jelentős mértékben hozzájárulnak a fehérjék szerkezeti és dinamikai sajátosságainak mélyebb megértéséhez.

1. Az értekezés egyik legfontosabb tudományos újítása a magányos α -hélix (SAH) motívumok bioinformatikai detekcióját lehetővé tevő **FT_CHARGE** eljárás, amely Fourier-transzformáció alapú megközelítéssel a töltésmintázatok szisztematikus vizsgálatán alapul. A módszer alkalmazása során releváns biológiai összefüggések is feltárássra kerültek, például a SAH motívumok előfordulása és lehetséges szerepe RNS-kötő fehérjékben és a sejtmagban kialakuló paraspeckle struktúrákban.

2. A Jelölt kiemelkedő érdeme továbbá a **sokaság-alapú szerkezeti modellezés módszertani fejlesztése**, különösen a GROMACS programcsomagba történő beavatkozásokkal (pl. MUMO szimulációk kiterjesztése S^2 és NOE alapú kényszerekre), valamint a **DIPEND** eljárás és **CoNSEnsX+** webszerver kidolgozása révén. Ezek a módszerek lehetővé teszik a funkcionálisan rendezetlen fehérjeszakaszok realisztikus, kísérleti adatokkal összhangban lévő modellezését és elemzését, amely az NMR-alapú szerkezetmeghatározás és a fehérjedinamika összekapcsolását új szintre emeli.

3. A **de novo fehérjeforejetkezés** szerkezeti aspektusainak vizsgálata szintén újszerű megközelítést képvisel az evolúciós bioinformatika területén, különös tekintettel a hipotetikus ősi genetikai kódok fehérjetermékeinek strukturális lehetőségeire. E kutatási irány nemcsak elméleti szempontból jelentős, hanem hozzájárul a fehérjeszerkezetek evolúciós eredetének jobb megértéséhez is.

A tézisekben összefoglalt tudományos eredmények több, jól körülhatárolható új eredményt tartalmaznak, amelyek egyértelműen megfelelnek az MTA doktora cím követelményeinek. A bizottság nagyra értékeli továbbá a jelölt vitakészségét és a szakmai tudományterületen való széleskörű tájékozottságát. Összhangban a bírálóbizottság szavazási eredményével, a bírálóbizottság az MTA doktori cím odaítélését javasolja.