

Analiza in silico wpływu substytucji pojedynczych aminokwasów na termostabilność syntazy skrobiowej SSI jęczmienia zwyczajnego (*Hordeum vulgare* L.)

Uczestnik	KOWALSKA OLGA
Szkoła	II LICEUM OGÓLNOKSZTAŁCĄCE Z ODDZIAŁAMI DWUJĘZYCZNYMI IM. ADAMA MICKIEWICZA W SŁUPSKU ul. Adama Mickiewicza 32 76-200 Słupsk

Tematyka (0–8 pkt)

- | | |
|------------------------------------------------------|---|
| 1. Zgodność treści plakatu z tematem | 2 |
| 2. Poprawność streszczenia | 2 |
| 3. Prawidłowe uzasadnienie podjęcia badań | 2 |
| 4. Właściwie sformułowany cel badań/problem badawczy | 2 |

Uzasadnienie Autorka podjęła ważny temat w żywieniu człowieka w ocieplającym się klimacie – termostabilność enzymu o kluczowym znaczeniu w syntezie skrobi w jęczmieniu zwyczajnym. Cel badań jest jasno sformułowany w ostatnim akapicie wstępu, a ze streszczenia można dowiedzieć się o najważniejszych założeniach i wynikach pracy.

Materiały i metody (0–10 pkt)

- | | |
|--------------------------------------------------------------------------|---|
| 5. Prawidłowy dobór i opis materiału badawczego (obiektu i terenu badań) | 2 |
| 6. Właściwy dobór parametrów mierzonych lub cech obserwowanych | 2 |
| 7. Prawidłowy plan badania | 2 |
| 8. Prawidłowy sposób rejestracji danych | 2 |
| 9. Opis materiałów i metod pracy umożliwiający ocenę wyników | 2 |

Uzasadnienie Jako uczennica liceum Autorka z pewnością musiała dużo pracy włożyć w opanowanie metod bioinformatycznych, z których korzystała. Każda metoda została opisana dostatecznie jasno, choć zwięźle, ale przy opisie każdej z nich jest odnośnik do literatury oryginalnej. Materiały i metody zostały opisane w taki sposób, że każda osoba, która chciałaby powtórzyć badania podjęte przez Autorkę byłby w stanie je powtórzyć na własną rękę.

Wyniki (0–6 pkt)

- | | |
|------------------------------------|---|
| 10. Właściwe opracowanie wyników | 2 |
| 11. Właściwe przedstawienie danych | 2 |
| 12. Właściwy opis wyników | 2 |

Uzasadnienie Autorka nie powtórzyła obliczeń i nie opracowała ich statystycznie, ale nie było

też takiej potrzeby. Modelowanie molekularne, choć mają w sobie elementy stochastyczne, wykonywane są wg określonych algorytmów i trudno się spodziewać, że będą "obserwacje odstające" w wynikach obliczeń tych samych modeli. Zresztą powtarzanie obliczeń byłoby czaso- i energochłonne, a przecież nie każdy ma dostęp do klastra obliczeniowego.

Prowadzenie dyskusji i wnioskowanie (0–6 pkt)

- | | |
|--------------------------------------------------|---|
| 13. Poprawność interpretacji uzyskanych wyników | 1 |
| 14. Poprawność dyskusji | 2 |
| 15. Wnioski prawidłowo sformułowane i uprawnione | 2 |

Uzasadnienie Mam uwagę do stwierdzenia, że aminokwasy w pozycjach "544 i 541 zlokalizowane są w pętli oddalonej od miejsca aktywnego enzymu", ponieważ wg modelu 4HLN z PDB, struktura krystaliczna była rozwiązana wraz z alfa-maltopentaozą, która imitowała substrat enzymu. Związek ten dokładnie zlokalizowany jest pod pętlą, w skład której wchodzi reszty 541 i 544. Nawet jeśli reszty te nie tworzą centrum katalitycznego, to trudno się spodziewać, że są obojętne wobec wiązania substratu. Pozycja 541 wg PDB to: LYS562 (auth: 541) – być może ten sposób numeracji wprowadził Autorkę w błąd? Moim zdaniem, odnosząc się do numeracji określanej jako "auth" (która jest zgodna z numeracją stosowaną przez Autorkę), obie reszty znajdują się bardzo blisko miejsca wiązania substratu. Jednak modelowanie molekularne jest jedynie wstępem do eksperymentalnej weryfikacji uzyskanych wyników i przedstawiona do oceny praca doskonale spełnia te założenia. Jest rzetelnie wykonana praca, w której uzyskano obiecujące dane do dalszych analiz. Zastanawiające jest natomiast to, że we wszystkich trzech wariantach wybranych do analiz, substytucje wprowadzone przez Autorkę wywołują destabilizację rejonu 205-215. Myślę, że Autorka to zauważyła (bo trudno tego nie zauważyć), ale trudno też to racjonalnie wyjaśnić. Przypuszczam, że z tego powodu nie został ten temat poruszony w dyskusji. Nota bene, ten rejon z pewnością jest oddalony od centrum katalitycznego i nie ma wpływu na aktywność katalityczną enzymu.

Spójność i forma pracy (0–6 pkt)

- | | |
|-----------------------------------------|---|
| 16. Właściwie cytowana literatura | 2 |
| 17. Poprawny układ pracy | 2 |
| 18. Poprawny język i słownictwo naukowe | 2 |
- Uzasadnienie Nie mam najmniejszych uwag dotyczących spójności i formy pracy.

Szczególne walory pracy (0–8 pkt)

Punktacja 8

Uzasadnienie Autorka wykazała się dużą samodzielnością podczas przygotowania pracy badawczej. Z pewnością wymagało to od niej dużego zaangażowania w poznanie i opanowanie wielu narzędzi bioinformatycznych. Autorka użyła sformułowania, że zdecydowała się "na bardziej racjonalne podejście" wybierając aminokwasy, które poddawała substytucjom. Warto zaznaczyć, że procesy ewolucyjne nie opierają się na racjonalnych przesłankach i być może praca przyniosłaby ciekawsze wyniki, gdyby losowo wprowadzono by substytucje. Takie podejście jednak wymagałoby ogromnej mocy obliczeniowej niedostępnej w warunkach domowych. Uważam, że Autorka wykonała możliwie najlepszą pracę o charakterze bioinformatycznym, jaką mogła przygotować w warunkach domowych. Problem badawczy jest dobrze umotywowany, obiekt badawczy

wybrała prawidłowo, użyła właściwych narzędzi i dobrze zinterpretowała wyniki, oczywiście z drobnymi zastrzeżeniami wskazanymi powyżej. Sądzę jednak, że praca jest doskonałym przykładem dla przyszłych olimpijczyków, dla których może posłużyć jako przykład oryginalnej i ciekawej pracy badawczej wykonanej z wykorzystaniem danych i narzędzi dostępnych dla każdego.

Suma pkt: 43/44