

Jan Heyda: Molekulární pohled na bezmembránové organely ve spolupráci s USA

28.4.2026 - Jakub Drahonský | Vysoká škola chemicko-technologická v Praze

Docent Jan Heyda z Ústavu fyzikální chemie VŠCHT Praha vede teoretickou část projektu „Bezmembránové organely v biologických prostředích“. Jeho skupina používá molekulární dynamické simulace k prozkoumání, jak vnitřně neuspořádané proteiny tvoří kondenzáty v buňkách. Spolu s docentem M. Vazdarem systematicky studují vliv iontů, bodových mutací v proteinech a složení membrán na vznik, stabilitu a adsorpci těchto struktur na atomární úrovni. Cílem je vytvořit predikční mapu a mělo by vést k lepšímu pochopení neurodegenerativních chorob a vývoji chytrých biomateriálů, v těsné spolupráci s experimenty profesora Paula Cremera z Pennsylvania State University.

O čem je váš projekt a co je jeho cílem?

Náš projekt zkoumá, jak v buňkách vznikají a fungují takzvané bezmembránové organely. To jsou dynamické útvary, ve kterých si buňka dočasně soustředí vybrané proteiny a RNA, aby některé procesy mohly probíhat rychleji a účinněji než v okolí. Na rozdíl od klasických organel, jako jsou mitochondrie nebo jádro, nejsou ohraničené membránou, ale vznikají samouspořádáním biomolekul do hustší fáze, tedy do takzvaného kondenzátu.

V projektu se soustředíme hlavně na vnitřně neuspořádané proteiny, které mají schopnost tyto kondenzáty vytvářet, ale zároveň jsou velmi citlivé na složení roztoku, drobné změny ve své sekvenci i na kontakt s biologickými membránami. Cílem je pochopit, co na molekulární úrovni řídí přechod od volně rozptýlených molekul ke kondenzovanému stavu a kdy je takový stav ještě funkční, nebo už může směřovat k patologickému chování.

Pokud bude projekt úspěšný, co nám přinese? Jak pomůže v medicíně nebo farmacii?

Stále se jedná o projekt základního výzkumu, takže jeho hlavní přínos bude v hlubším porozumění chování proteinů v biologickém prostředí. Takové poznání je důležité pro výzkum neurodegenerativních onemocnění, kde některé proteiny ztrácejí správné chování, ale také obecně pro biofyziku proteinů a vývoj biomateriálů či biotechnologických aplikací. Nejde o projekt, který by hned vedl k nové léčbě, ale může přispět k tomu, aby budoucí cílenější zásahy stály na pevnějším vědeckém základě.

Vy máte na starost teoretickou část. Jak probíhají experimenty?

Experimentální část probíhá v laboratoři profesora Paula Cremera na Pennsylvania State University. Jeho tým připravuje studované polypeptidy a sleduje jejich chování v přítomnosti solí o různých koncentracích a/nebo na površích membrán. Pomocí spektroskopických a termodynamických metod zjišťuje, za jakých podmínek kondenzáty vznikají, jaké mají složení a jak jsou stabilní. Výhodou projektu je, že experimenty a simulace jsou od začátku navrženy tak, aby popisovaly stejné systémy.

Jak jste se dostal k týmu profesora Paula Cremera na Pennsylvania State University?

V rámci svého doktorského studia u profesora Pavla Jungwirtha jsem studoval, jak přítomnost iontů

ovlivňuje chování biomolekul. Profesor Cremer patří v této oblasti k nejvýznamnějším osobnostem a postupně se z odborného kontaktu vyvinula dlouhodobá spolupráce mezi experimentem a teorií. V rámci tématu iontově specifických efektů jsme se od polymerů a peptidů postupně dostali až k otázce, jak lze ovlivňovat proteinové kondenzáty a bezmembránové organely.

Jak se liší experimenty od simulací?

Experiment ukazuje celkové chování systému, ale dílčí molekulární příčiny z něj často přímo nevyčteme. Simulace umožní podívat se dovnitř a sledovat, které konkrétní molekulární interakce k tomuto chování vedou. V experimentu tedy vidíme výsledek, v simulaci jeho detaily. Každý přístup má své limity, ale právě jejich kombinace nám umožňuje získat mnohem přesvědčivější a ucelenější obraz, než kdybychom používali jen jeden z nich.

Jak probíhá spolupráce teoretika s experimentátorem?

Na začátku to bývá hlavně o hledání společného jazyka, zvláště u komplexních témat. Teoretik i experimentátor se na stejný problém dívají jinak a chvíli trvá, než si oba ujasní, co je pro toho druhého realistické. Jakmile se to podaří, začne vznikat opravdu silná spolupráce: experiment pomáhá ukotvit simulace v realitě a simulace naopak dávají experimentům detailní, fyzikálně podloženou molekulární interpretaci.

Jak jste se dostal k fyzikální chemii a počítačovému modelování?

Vystudoval jsem matematické gymnázium v Českých Budějovicích a chemie, matematika a fyzika mě bavily, takže studium fyzikální chemie pro mě bylo přirozenou volbou. K počítačovým simulacím jsem se pak dostal přes statistickou termodynamiku, když jsem si uvědomil, že analyticky řešitelných problémů je pomálu. Naopak počítačové simulace nám umožňují sestavit i velmi komplikované systémy, studovat je na mikroskopické úrovni a dojít k mechanistickému porozumění klíčových dějů. To mě stále baví.

Co vás zformovalo do současného vědce?

Zásadní pro mě byly tři věci: podporující prostředí ve skupině profesora Pavla Jungwirtha, postdoktorandská zkušenost u prof. Dzubielly a také rozmanité spolupráce, díky nimž jsem pochopil, že nejlepší výsledky často vznikají kombinací více pohledů, které se navzájem doplňují.

Co komisi přesvědčilo podpořit váš projekt?

Cesta k podpoře nebyla úplně přímočará, ale o to víc jsme návrh postupně zpřesňovali a posilovali o předběžné výsledky. Myslím, že rozhodla kombinace aktuálního vědeckého tématu, silného propojení experimentu se simulacemi a dlouhodobé spolupráce, která už přinesla konkrétní špičkové výsledky.

S kým ještě na projektu spolupracujete?

Na české straně je mým klíčovým spolupracovníkem docent Mario Vazdar, který svou expertizou pokrývá interakce biomolekul s membránami. Dále jsou do projektu zapojeni také členové našich skupin a doktorandi.

V jakém formátu budete sdílet vaše výstupy?

Výsledky budeme sdílet standardně formou odborných publikací a konferenčních vystoupení. Simulační data plánujeme zpřístupnit pouze pro vybrané systémy, a to z důvodu jejich značného objemu (10GB/simulace). Pro ostatní systémy poskytneme vstupy, parametry a analytické postupy,

které umožní naše výsledky reprodukovat nebo na ně navázat.

Chystáte se popularizovat výsledky pro veřejnost?

Ano, určitě. Přírozenou součástí budou odborné semináře, studentské práce a prezentace, ale budeme rádi i za popularizační přesah směrem k širší veřejnosti.

Sháníte na tento projekt studenty? Případně jaké?

Ano, studenty hledáme. Projekt nabízí témata pro doktorandy zaměřené na počítačové modelování i pro studenty, kteří mají blízko k experimentu, termodynamice, biofyzice nebo biochemii. Atraktivní je právě širší tématu, možnost pracovat s moderními metodami a také napojení na skutečnou mezinárodní spolupráci.

<https://www.vscht.cz/popularizace/rozhovory/jan-heyda-bezmembranove-organely>