

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

**Autorka: Bc. Katarína Baxová**

**Název práce: Pairing of biologically relevant ions in aqueous solutions**

Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2018

**Jméno a tituly oponenta: doc. RNDr. Milan Předota, Ph.D.**

Pracoviště: Ústav fyziky, Přírodovědecká fakulta, Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích

Kontaktní e-mail: predota@prf.jcu.cz

**Odborná úroveň práce:**

- vynikající    velmi dobrá    průměrná    podprůměrná    nevyhovující

**Věcné chyby:**

- téměř žádné    vzhledem k rozsahu přiměřený počet    méně podstatné četné    závažné

**Výsledky:**

- originální    původní i převzaté    netriviální kompilace    citované z literatury    opsané

**Rozsah práce:**

- veliký    standardní    dostatečný    nedostatečný

Pozn: Rozsah odevzdané práce je standardní, ale rozsah provedené práce je veliký, což je podpořeno i publikační činností.

**Grafická, jazyková a formální úroveň:**

- vynikající    velmi dobrá    průměrná    podprůměrná    nevyhovující

**Tiskové chyby:**

- téměř žádné    vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet    četné

**Celková úroveň práce:**

- vynikající    velmi dobrá    průměrná    podprůměrná    nevyhovující

**Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/opponenta:**

Diplomová práce zařazuje do společného rámce tři studie, z nichž první dvě jsou si metodicky blízké a věnované počítačovému modelování, zatímco třetí je experimentálním přístupem zcela odlišná. Všechny výborně zapadají do oboru studia a obě části by (experimentální po rozšíření textové části) dle mého názoru i samostatně byly kvalitními diplomovými pracemi.

Oceňuji kombinací klasických i kvantových simulací, pečlivostí testování potenciálních vlivů parametrů výpočtů na výsledky, podrobným popisem simulačních parametrů, který umožňuje reprodukovatelnost výsledků, určováním odchylek a v neposlední řadě textem v kvalitní angličtině, ze kterého je patrná fundovanost autorky. Ke kvalitě odborné části nemám žádné připomínky a mohu jen chválit. Ostatně zapojení autorky do publikování kvalitních vědeckých článků to jen potvrzuje. Vzhledem k tomu, že práci vznikala ve větším týmu, oceňuji i objasnění autorky, které výsledky získala osobně, a kde porovnává s výsledky kolegů. Experimentální část je jasně popsána a naměřené výsledky interpretovány způsobem, který přispívá k objasnění mechanismů pasivního průniku peptidů modelovou biomembránou.

Zpracování diplomové práce by šlo (vždy) vylepšit, ale s výjimkou prvního bodu jsou to spíše jen podněty a drobné výtky.

1. V části 1.1 (a v menší míře i v dalších částech první kapitoly) jsou krátce uvedeny mnohé pojmy z interakčních potenciálů a metodiky simulací, u většiny však chybí odkazy na literaturu pro zájemce o hlubší prostudování – ať už původní články nebo vhodné manuály k simulačním programům. Jako příklady uvádím např. bod „Inverse Term“ na str. 8 nebo „Blue-Moon Sampling“ na str. 18. Takto stručné zmínky bez odkazů považuji za nevhodný „kompromis“ mezi řádným uvedením do problematiky a vypuštěním těchto bodů celkovým odkázáním na literaturu.
2. V poslední větě prvního odstavce na str. 29 má být „solvent-shared ion pair“ místo uvedeného „contact ion pair“.
3. Figure 2 na str. 4 je v tištěné verzi špatně zobrazen.
4. V anglicky psané práci jsou v kapitolách 1-3 nevhodné grafy s desetinnými čárkami v popisech os.
5. V části 2.2.2 by jistě zasloužilo podrobnější vysvětlení určování Baderových nábojů, speciálně v systému s nenulovým nábojem kompenzovaným nabitým kontinuem – ale kvituji, že zde autorka řádně odkazuje na literaturu.

#### **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

1. V části 2.2 jsou popisovány kvantové umbrella sampling simulace prováděné dvojmo s počátečními konfiguracemi lišícími se koordinačním číslem kyslíků kolem vápníku. Oceňuji uvědomění si závislosti krátkých simulací na počáteční konfiguraci a připojuji dva dotazy: Byly v průběhu 60 (50 bez ekvilibrace) ns běhu pozorovány změny koordinačního čísla? Pokud ne, resp. málo, pak i průměrné křivky volné energie jsou ovlivněny relativní vahou (zde efektivně 50:50) počátečních struktur. Nakolik jsou odchylky uvedené v tabulce 2.6 způsobené právě průměrováním přes dvě simulace s různým počátečním koord. číslem a nakolik reálnými fluktuacemi během simulace?
2. V jakých jednotkách je uvedena rovnice 1.15?

#### **Práci**

doporučuji uznat jako diplomovou/bakalářskou.

#### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Č. Budějovice, 1. 9. 2018

