

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče: Tomáš Blovský

Název práce: Interakce peptidů s modifikovanými lipidovými membránami (Počítačová studie)

A. Bodové hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte právě jednu z možností)

1. Rozsah BP a její členění	
	A - přiměřené, odpovídají charakteru BP a významu jednotlivých částí
	B - nevyrovnané, členění není logické n. rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s jejich významem
	C - uspokojivé, rozsah některých částí nedostačuje
x	N - nedostatečné

2. Odborná správnost	
	A - výborná, bez závažnějších připomínek
	B - velmi dobrá, s ojedinělými drobnými závadami (nejasnost výkladu, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo výsledků)
	C - uspokojivá, s četnějšími drobnými závadami
x	N - nevyhovující, s hrubými chybami

3. Uvedení použitých literárních a j. zdrojů	
	A - bez připomínek, všechny převzaté údaje s citací zdroje, celkový počet citací odpovídá charakteru práce
	B - uspokojivé, s občasnými neobratnostmi zejm. v umístění odkazů, nebo s celkově nižším počtem citací
x	C - s vážnějšími závadami, např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky, nebo se ojediněle vyskytuje opominutí odkazu na zdroj převzatých dat
	N - nevyhovující, velmi málo citací, ev. rysy plagiátu (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)

4. Jazyk práce	
	A - výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb
	B - velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby
x	C - upokojivý, četnější slohové neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby, ojediněle se vyskytují obtížně srozumitelné n. nejednoznačné formulace
	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

5. Formální a grafická úroveň práce	
	A - výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
	B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu citací, překlepy, chybějící zkratky apod.
x	C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo četnějšími drobnými chybami

5. Formální a grafická úroveň práce

N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

Případný slovní komentář k bodům 1. až 5. :

Předložená práce je zaměřena na studium interakce antimikrobiálních peptidů s bakteriální membránou pomocí metod výpočetní chemie. Využívá k tom specifický zjednodušený model částicové dynamiky, který aplikuje ke studiu interakce fosfolipidové membrány s bivalentními kationty a pozitivně nabytými částicemi představujícími bazické peptidy, své výsledky pak porovnává s publikovanou prací jiných autorů. Bohužel musím konstatovat, že zpracování práce je na nízké úrovni a k práci mám řadu připomínek.

Ad. 1.

Samotný název práce „Interakce peptidů s modifikovanými lipidovými membránami“ je poněkud zavádějící, neboť práce o modifikacích membrán prakticky nehovoří.

Abstrakt by neměl obsahovat citace. Pokud citace již obsahuje, měly by být plné tedy nezávislé na vlastním textu práce.

V práci úplně chybí část metody. Tudíž je obtížné zjistit všechny parametry provedených simulací, které byly použity. Zmínky o použité metodice lze nalézt v různých částech kapitoly výsledky ale jejich výčet zde není úplný.

Kapitola 1.4 „Počítačové modelování membrán“ (str. 28) pokrývá jen úzkou problematiku disipativní částicové dynamiky a modelování membrány vůbec nezmiňuje.

Tabulka 3.3 na str. 38 je nadbytečná. Označení simulací by bylo možné jednoduše popsat v textu. Navíc uvádí označení pro simulace, které nejsou ve výsledcích nikde uváděny (např. M250+0P).

Ne všechny data jsou v práci ukázána. Např. obrázek 3.5 (str. 39) ukazuje hustotní profily jen jednoho z pěti simulovaných systémů. Nenalezl jsem v textu vysvětlení, proč byla vybrána daná simulace ani jestli se ty ostatní nějak liší.

Nepřípadne mi obvyklé, aby práce neobsahovala výsledky, které budou prezentovány až při obhajobě jak autor uvádí v diskuzi na str. 43 dole „Simulace však stále pokračují a doufám, že při obhajobě budu mít k dispozici lepší výsledky s dostatečně malými statistickými chybami.“

V diskuzi na str. 43 autor uvádí větu „Vzhledem k omezené kapacitě MetaCentra a vysoké vytíženosti tamních počítačů jsem často dlouho čekal ve frontě na spuštění simulací a ne všude jsem se statistikou simulačních dat spokojen.“ Ve výsledcích ani v metodice jsem ovšem nenalezl žádnou zmínku o statistickém zpracování dat ani popis její metodiky. Přesto zmínka o spokojenosti či nespokojenosti se statistikou je v diskuzi na několika místech.

Ve výsledkové části na str. 50 se autor odkazuje na výsledky a obrázek jiných autorů, což je velmi neobvyklé. Obrázek není v práci navíc ani ukázán. Kdyby byl obrázek převzat z literatury a porovnán s prezentovanými výsledky hodil by se do diskuze. Není také standardí se v kapitole výsledky tak často odkazovat na publikace jiných autorů např. citace [50] je navíc ve výsledcích na str. 35 citována čtyřikrát.

Ad. 2

Zdaleka ne všechny eukaryotické buňky obsahují ve svých membránách cholesterol, jak uvádí autor na straně 12 uprostřed.

Když uvádíte, že nějaká část molekuly je nabitá, bylo by také vhodné uvádět znaménko a velikost onoho náboje (např. str. 33).

Na str. 34 se uvádí, že „... dvoumocný kationt M je tvořen ze dvou částic rozpouštědla, mezi nimiž je vazba o vysoké tuhosti ...“ Je velmi neobvyklé lokalizovat náboj u kationtů kovů jinak než do jednoho bodu. V práci není uvedena, jaká je rovnovážná vzdálenost mezi těmito body, nicméně částice, jež by měli představovat tyto kationty na obr. 3.6 tvarem připomínají např. molekuly kyslíku. V práci je pouze uvedena „tuhost vazby“ $k = 250$, ovšem bez uvedení jednotky.

Na str. 36 jsou zavedeny proměnné x a y , avšak u nich je uvedeno pouze několik čísel bez vysvětlení a uvedení jednotky. Tyto proměnné nejsou ani v seznamu zkratk. Čtenář si musí domýšlet, co tím autor myslel.

Jsou diskutována fakta, která nejsou ve výsledcích uvedena. Např. věta na str. 44 „Při zvyšování koncentrace dvojmocných kationtů vzrůstá hodnota hustoty v maximu jen mírně a většina kationtů se rozpouští v roztoku.“ Ve výsledcích by měly být uvedeny počty nebo procenta iontů v roztoku *versus* iontů v membráně. Nicméně podle obr. 3.4.b se zdá, že větší část iontů je lokalizována v blízkosti membrány. Hranice mezi ionty v roztoku a těmi, které jsou u membrány, by měla být definována a v obrázku graficky znázorněna.

Při pohledu na graf 3.7. se mi nezdá formulace uvedená na str. 44, kde je uvedeno „Je vidět, že vzrůstající koncentrace dvojmocných kationtů mírně omezuje navazování peptidů. ...“. předpokládám, že navazování lipidů se myslí asociace peptidů s povrchem membrány. Poté mi připadne, že tento trend je slabý nebo možná i opačný.

Ad 3.

Pokud je obrázek převzat z internetu (1.1., 1.2, 1.3 a 1.4), měl by být řádně citován v seznamu citací a ne webovým odkazem v popisu obrázku.

Pokud jsou citovány knihy, měly by být uvedeny čísla stran, na kterých se citovaný fakt nachází.

Uvádět citaci v názvu kapitoly je velmi nestandardní (str.15).

Na str. 15 mluvíte o fosfolipázách a zmiňujete, že jsou intenzivně studovány, ale ty citace neuvádíte.

Na obrázek 1.4 není v textu odkaz. Navíc schéma na obrázku neukazuje ATPázu, ale Na^+/K^+ pumpu s ATPázovou aktivitou.

Ad 4.

Četné formulační neobratnosti ztěžují pochopení vědeckého přínosu práce. Např. na str. 39 v popisu obrázku 3.5 věta „Celkový náboj ($H_q+M+Q_p+Q_n$ zelenomodře) má pro větší názornost pro celkový záporný náboj hodnotu menší než nula.“

Ve výsledcích a diskuzi se u autora střídá jednotné a množné číslo.

„Lipidní molekuly“ není správný výraz, spíše „molekuly lipidů“. Rovněž hovorové výrazy typu „nasimulovaná membrána“ nejsou vhodné.

Na str. 43 uprostřed uvádíte, že „Na jednotlivé strany membrány byl náhodně rozmístěn vždy poloviční náboj.“ Co je tím myšleno?

Ad 5

Popisky obrázku 1.2 je nečitelný.

Pokud je odkaz na obrázek, který je několik stránek mimo citaci, je vhodné uvést také stranu, na které se obrázek nachází.

V práci nejsou u většiny veličiny uváděny jejich jednotky!

Není vhodné používat u obrázků dvouúrovňový popis. Kdy část textu je společná pro obě části a část textu pouze pro jednu z nich. Navíc dochází k duplikaci informací (např. obrázek 3.9).

Seznam zkratk není řazen abecedně. Zkratky α , μ_{ext} , k a P jsou použity dvakrát a to i pro zcela různé veličiny. Zkratka γ je duplikována.

B. Obhajoba

Dotazy k obhajobě

Jakým způsobem byla získána vstupní struktura pro simulaci. Jednalo se o samo-skládání či membrána byla vytvořena prostřednictvím nějakého programu?

Mohl byste stručně uvést na jednom místě podmínky simulace (teplota, periodický box, délky simulací, použité statistické metody, aj).

Na základě jakých údajů bylo konstatováno, že systém je ekvilibrován?

V práci se používá simulace hypotetických bivalentní kationtů $2+$. Který z fyziologicky relevantních kationtů mají částice simulovat?

Na obr. 3.7a a 3.9.b se zdá, že nabitý peptid je lokalizován uprostřed hydrofobního segmentu membrány. Je toto chování v souladu s experimenty?

Na obr. 3.4a (str. 39) se zdá, že částice simulující dvojmocné kationty překvapivě vytváří v blízkosti membrány agregáty. Jak si to vysvětlujete?

Stanovisko k opravě chyb v práci:
opravný lístek/oprava v textu **JE** **NENÍ** (zakroužkujte) podmínkou přijetí práce

C. Celkový návrh

Mé celkové hodnocení práce je mezi **Dobře** a **Neprospěl**

Navrhovaná celková klasifikace (výborně, velmi dobře, dobře, neprospěl)

Datum vypracování posudku: 20.7. 2020

Jméno a příjmení, podpis oponenta (SIS): Mgr. Petr Jeřábek Ph.D.