

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky : Jakub Martinka

Název práce: Studium přístupových cest naftalenu do cytochromu P450 1A2

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

1. Rozsah BP a její členění	
A	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
	N - nedostatečné

2. Odborná správnost	
	A - výborná, bez závažnějších připomínek
B	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
	N - nevyhovující, s hrubými chybami

3. Uvedení použitých literárních a j. zdrojů	
A	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
	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	A - výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb
	B - velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby
	C - uspokojivý, 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	B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu citací, překlepy, chybějící zkratky apod.
	C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo četnějšími drobnými chybami
	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

Případný slovní komentář k bodům 1. až 5. :

Cytochromy P450 jsou intenzivně zkoumané enzymy účastníci se metabolismu celé řady látek. Příspěvek studenta rozšiřuje jejich poznání o popis možných způsobů transportu molekuly naftalenu, jako modelu aromatických látek, do aktivního místa enzymu P450 1A2 pomocí metod molekulového modelování. Student využil model enzymu vytvořený na pracovišti školitele, ten upravil pro potřeby své práce, uskutečnil sérii MD simulací, které důkladně analyzoval. Cíle práce byly tedy bezesporu splněny.

Práce je dobře členěná. Její kvalitu trochu snižuje opakování informací. Např. reakční mechanismus P450 je popsán na straně 10 a zároveň v popisu Obrázku 4, přičemž význam diagonální cesty ve schématu není vysvětlen ani v jednom případě. Rušivě na mě působilo uvádění čísel stran v odkazech na obrázky a tabulky. Ve výsledkové části mohla být kapitola 4.2 uvedena jako první.

Práce bohužel obsahuje několik nepřesných nebo i chybných informací. Níže uvádím nejzávažnější, které by bylo vhodné opravit.

- Strana 12: „... popisující závislost elektronové energie na ...“, ve skutečnosti se jedná o potenciální energii, která kromě „elektronové energie“ zahrnuje efektivní interakci elektronů s jádry a repulzi jader.
- Strana 13: rovnice 7 je chybná. Silové pole, které student využil ve své práci, používá kosinovou řadu pro popis potenciální energie torzních úhlů. Harmonickou aproximaci je možné taktéž použít (ačkoliv v jiném tvaru, než uvádí student), ale pro jiné molekulární systémy než biomolekuly. Oprava by se měla zohlednit i v poslední větě popisku Obrázku 5.
- Strana 14: disperzní síly působí mezi všemi atomy a nejenom mezi nepolárními molekulami. r_0 je rovnovážná vzdálenost interagujících atomů, a ne poloměr atomu.
- Strana 7: Funkce znázorňující „interakční useknutí“ se značně nezdařila.

Shoda 31% deklarovaná protiplagiátorským programem TURNITIN je způsobena použitím citací uvedených včetně plných názvů publikací v kapitole „7 Seznam použité literatury“. V ostatních částech bakalářské práce se jedná o původní či řádně citovaný text.

B. Obhajoba

<i>Dotazy k obhajobě</i>
<ol style="list-style-type: none">1) Jaká je koncentrace enzymu a molekul naftalenu v simulovaném prostředí? Nepozoroval student nežádoucí efekty vedoucí k deformaci (denaturaci) proteinu?2) Jaká je schopnost programu CAVER hledat tunely, které jsou v nativním stavu enzymu uzavřeny a jejich otevření je indukováno až přicházejícím substrátem? Existují alternativní metody schopné popsat uvedené chování?3) Co vedlo k volbě molekuly naftalenu? Proč nebyl např. použit benzen, který je menší a vykazuje větší symetrii?

Stanovisko k opravě chyb v práci:

opravný lístek/oprava v textu **JE** (zakroužkujte) podmínkou přijetí práce

C. Celkový návrh

Navrhovaná celková klasifikace: **výborně**

Datum vypracování posudku: Brno, 10. 9. 2020

Jméno a příjmení, podpis oponenta: RNDr. Petr Kulhánek, Ph.D., Masarykova Univerzita