

## Posudek školitele bakalářské práce

Během práce na svém bakalářském projektu "Molekulové simulace acidobazického chování oligopeptidů" získala Magdaléna Nejedlá řadu znalostí a dovedností, které jsou využitelné nejen pro práci v chemickém výzkumu, ale lze je využít i mimo oblast chemie. Hlavním výstupem práce jsou nové vědecké poznatky získané ze simulací. Po dalším rozšíření a doplnění pravděpodobně povedou k odborné publikaci v impaktovaném časopise.

Protože předložená bakalářská práce může na první pohled působit poněkud stručně, považuji za vhodné zmínit, že za ní stojí značné množství práce, které není na první pohled viditelné. Aby mohla svůj projekt řešit, musela Magdaléna rozšířit svoje znalosti z různých oblastí, které nejsou obvyklou součástí studia medicínské chemie, konkrétně základy programování v jazyku python a práce v operačním systému Linux. Dále si musela doplnit znalosti z fyziky a ze statistické termodynamiky. Toto rozšíření znalostí vyžadovalo značné úsilí a časovou investici, ačkoliv samo o sobě nevedlo na výstupy, které by šlo zahrnout mezi výsledky bakalářského projektu. Představovalo jakousi vstupní podmínku, jejíž splnění umožnilo, že byla schopna samostatně realizovat simulace a zpracovat jejich výstupy.

Souběžně s rozšiřováním svých znalostí připravila Magdaléna s mou pomocí sérii skriptů pro spouštění svých vlastních simulací za daných podmínek (pH, koncentrace peptidu, koncentrace soli). Následně připravila skripty pro automatizovanou statistickou analýzu výstupů a grafickou prezentaci výsledků. Správnost svých simulací a analýzy pak otestovala srovnáním s výsledky simulací z našich dřívějších publikací. Po této celkem zdouhavé a náročné přípravě provedla simulace vybraných peptidů pomocí dvou různých modelů. K sestavení modelů použila knihovnu "sugar", kterou vyvíjí postdoc Pablo Blanco pro zjednodušení coarse-grained simulací různých peptidů, které provádíme v naší skupině. Tato knihovna zatím není zcela dokončena, nicméně, Magdaléna byla jejím prvním "testovacím" uživatelem. Díky její práci se nám povedlo odhalit nedostatky prvních verzí knihovny i některé chyby v nastavení parametrů modelu, které nebyly na první pohled viditelné, protože měly jen malý vliv na konečný výsledek. Samotné provedení simulací peptidů a jejich následné zpracování do bakalářské práce pak představovalo jen malý zlomek práce, kterou Magdaléna na svém projektu udělala, avšak jedině tato část práce vedla k hmatatelným a prezentovatelným výsledkům.

Na závěr bych rád ocenil spolupráci s Magdalénou při interpretaci výsledků a při jejich srovnávání s daty z literatury. Samostatně navrhovala různé postupy pro srovnání svých výsledků jak se simulacemi tak s experimentálními daty z literatury. Toto srovnání představuje nelehký úkol s ohledem na to, že není předem jasné jaké vstupní hodnoty pKa jsou ty správné. Některé postupy jsme nestihli vyzkoušet před odevzdáním bakalářské práce, nicméně, tímto naše snaha nekončí. Předpokládáme, že po podrobnějším srovnání, včetně použití různých vstupních hodnot pKa a srovnání s velmi rychlým programem pepKalc, vyústí naše úsilí v odbornou publikaci.

Na základě výše uvedeného doporučuji předloženou práci Magdalény Nejedlé k obhajobě a navrhuji hodnocení "výborně".

V Praze, dne 3. února 2022

Peter Košovan