ÚOCHB AV ČR

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE A BIOCHEMIE
AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY
INSTITUTE OF ORGANIC CHEMISTRY AND BIOCHEMISTRY
ACADEMY OF SCIENCES OF THE CZECH REPUBLIC

Posudek oponenta

Diplomová práce Bc. Vlastimila Zímy se zabývá simulacemi molekulové dynamiky aplikované na biologicky relevantní systémy, jako jsou nukleové kyseliny, bílkoviny a fosfolipidové membrány. Práce má poměrně rozsáhlý úvod s pěkným přehledem problematiky nukleových kyselin, bílkovin, membrán a virů. Krátce jsou také uvedeny základní pojmy z molekulové dynamiky s důrazem na metody výpočtu volné energie. Popis vlastní práce diplomanta se pak týká testování propagátorů pro molekulovou dynamiku a řady zajímavých aplikací. Diplomant studoval strukturu aktivního místa polymerasy virů HCV a HIV, jakož i průchod molekul přes lipidovou membránu a modelově i přes rozhranní voda/pára. Získané výsledky jsou v práci podrobně a přehledně popsány a dokumentovány celou řadou ilustrací. K práci nemám žádné zásadní výhrady, přesto si dovolím několik poznámek a dotazů:

1. Kapitola 2.2 velmi podrobně popisuje získané výsledky. Chybí mi však nějaké přehledné shrnutí, ze kterého by jasně vyplynulo, k čemu studie sloužila a kam případně směřuje další úsilí.
2. V kapitole 2.3 by mě zajímalo, zda získaný profil volné energie methanu souhlasí s experimentem (např. s Henryho konstantou) či jinými simulacemi.
3. Ostré minimum na profilu volné energie guanosinu v Obr. 2.41 se mi jeví spíše jako artefakt simulace než jako reálný efekt. Ocenil bych proto autorův komentář.

Flemingovo nám. 2
166 10 Prague 6
Czech Republic

Tel.: +420-2-20410314
Fax: +420-2-20410320
e-mail: pavel.jungwirth@uochb.cas.cz

Závěrem je mi potěšením doporučit disertační práci Bc. Zímy k obhajobě a navrhnout výborné hodnocení.

doc. Mgr. Pavel Jungwirth, DSc.