

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

posudek vedoucího  
X bakalářské práce

X posudek oponenta  
 diplomové práce

Autorka: Alexandra Kukharchuk

Název práce: Interakce aminokyselin s fosfolipidovými monovrstvami

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná Fyzika

Rok odevzdání: 2014

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.

Pracoviště: KCHFO

Kontaktní e-mail: pospasil@karlov.mff.cuni.cz

## Odborná úroveň práce:

vynikající  velmi dobrá X průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

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

## Výsledky:

originální X původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

veliký X standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

vynikající  velmi dobrá  průměrná X podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet X četné

## Celková úroveň práce:

vynikající  velmi dobrá X průměrná  podprůměrná  nevyhovující

### **Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:**

Studentka si za svou bakalářskou práci zvolila téma „Interakce aminokyselin s fosfolipidovými monovrstvami“, přičemž tyto interakce zkoumala metodami molekulárních simulací. Bakalářská práce je dobře členěna, v úvodu seznamuje se základními údaji o aminokyselinách a buněčných membránách, navazuje informacemi o teorii k molekulárním simulacím, přičemž jsou zmíněny jak kvantová, tak klasická molekulová dynamika. V praktické části jsou vhodně zvoleny a popsány postupy pro vytvoření iniciálních modelů a jejich optimalizace. Jednak pro Leucin ve vodě tak na povrchu resp. rozhraní voda – vzduch a dále interakce Leucinu s monovrstvou DPPC na rozhraní voda- vzduch. Byly provedeny i drobné analýzy simulovaných dat v rozsahu pro bakalářskou práci velmi dobrém.

Proto mě velmi mrzí, že se studentka nevyvarovala velkého množství, a to více než dvou desítek typografických chyb, resp. nezkontrolovala text v nějakém editoru, který kontrolu umožňuje.

Dále se bohužel zcela nezdařilo zpracovat správným a vhodným postupem použitou literaturu.

Jednak jsou reference uváděny ve třech různých formátech, přičemž by styl psaní měl být jednotný; citovaná literatura není uvedena v textu bakalářské práce; reference 1, 9, 14, 15, 19, 20, 30 obsahují chyby a to jak v názvech, ve jménech, dohledatelnosti – špatně uvedené bibliografické údaje (20) a v neposlední řadě literatura není v textu uváděna postupně dle číslování.

Dalšími nepřesnostmi jsou např. tyto: na str. 16, kde není uvedena reference k Berendsenovu barostatu, ačkoliv reference k Parrinello-Rahmanovu a Nosé-Hooverovu jsou uvedeny. Obrázek 3.6 nemá kompletní popis, chybí odkaz na vodu; odkaz na obrázek 4.8 předchází odkazu na obrázek 4.3 a následně. Na str. 26, 2. řádek je uvedeno, že DPPC je ve formě zwitterionu ( $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{PO}_4$ ), přičemž dusík je navázán na uhlíky.

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

V práci je uvedeno, že bylo zkoumáno chování leucinu na rozhraní voda-vzduch, dle obrázků a popisu je spíše zkoumáno chování leucinu na rozhraní voda-vakuum. Existují práce, uvádějící jak by se případně změnilo chování leucinu nebo jiné aminokyseliny na povrchu, pokud by byly do simulace zahrnuty molekuly vzduchu nad povrchem?

Na straně 25 se uvádí, že „Výskyt klastrů s rostoucí velikostí (tj. počtem molekul tvořících daný klastr) exponenciálně klesá.“ Jakým způsobem bylo tohoto tvrzení dosaženo? Vizualní analýzou nebo bylo započato s nějakou podrobnější analýzou tvorby klastrů uvnitř roztoku nebo je toto známo z literatury?

### **Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

### **Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 25. 8. 2014

RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.