

Posudek oponenta na bakalářskou práci

**Jan Kadlec: Modelování interakcí bílkovin s ionty a membránami**

Vedoucí bakalářské práce: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, CSc., DSc.

Práce se zabývá výpočtem profilu Gibbsovy energie myristamidu (jako modelu myristylové kotvy recoverinu) a rovněž nemyristylovaného recoverinu při zasouvání do fosfolipidové membrány. Práce je součástí většího projektu skupiny, jehož výsledky byly publikovány ve dvou přiložených článcích.

V rešeršní části práce (**kap. 1 Recoverin**) je nejprve rozebrána funkce recoverinu ve fotoreceptorní buňce, s dostatečným množstvím souvislostí a s nadhledem. Tuto část jsem četl s chutí a leccemu jsem se přiučil.

Méně jsem byl spokojen s **kap. 2 Modelování**, kde se míchají pojmy různé úrovně: molekulová dynamika (simulační metoda) a silové pole (popis energie systému). Zmatení pojmů je nejlépe vidět na chybné definici zkratk AA a CG na str. 34: AA a CG nejsou „částí klasické MD“, ale typem modelu molekulárních systémů, který může být použit i pro mnoho jiných účelů (refinement, výpočet základního stavu [optimalizace struktury], Monte Carlo simulace, QSAR, QSPR . . .), naopak síly pro klasickou MD můžou počítat metodami kvantové chemie. Očekával bych i detailnější popis metody deštníkového vzorkování (US), která je pro práci klíčová; z formálního hlediska však nelze nic namítat, neboť text je patřičně ozdrojován. Věta na str. 13 „periodické okrajové podmínky . . . simulují reálné prostředí“ je velmi nešikovné tvrzení, stejně jako definice ergodického systému na str. 14.

**Kap. 3 Parametry** podává dostatečné množství technických informací s tím, že detaily lze najít v obou zmíněných publikacích (resp. jejich SI).

**Kap. 4 Výsledky a diskuze** představuje jádro práce. Jednotlivé výsledky jsou detailně popsány a různé aspekty důkladně rozebrány, snad s jedinou výjimkou, a to je rozdíl mezi minimem volné energie stanovené metodou US při zasouvání a vysouvání myristamidu na obr. 4.3. Tento rozdíl (2 kcal/mol) není příliš velký vzhledem ke složitosti výpočtu, nicméně je větší než udaná nejistota, přitom výsledky na první pohled nevykazují hysterezi (překlopení z jednoho stavu do druhého), což bývá problém podobných výpočtů. Tento aspekt by chtělo lépe okomentovat.

Formální úroveň textu je dobrá, s minimem překlepů a chyb různého druhu: „dvanáctiuhlíkatá nenasycená mastná kyselina myristová“ na str. 8, „nebo-li“ na obr. 4.2, „dihedrální“ na str. 12 (správně „diedrický“ podle vzoru „tetraedrický“). Počestřování temínů by mělo být jednotné, není možné počestřit polovinu slova a druhou nechat v původním pravopisu (tedy buď „hipokalcin“ nebo „hippocalcin“, ale ne „hippokalcin“). Jednotku kcal je slušné definovat, neboť máme různé druhy, byť lišící se jen málo. Slovo „vnu“ (obr. 4.3) jsem nenašel ani ve slovníku spisovné češtiny, ani staročeštiny ani v slovníku nářečí.

Na závěr konstatuji, že p. Kadlec zvládl principy vědecké práce i technologii biomolekulových simulací od použití počítačových klastrů přes konkrétní sadu softwarových balíčků po zpracování výsledků. Na bakalářské úrovni se jedná o výborný výkon, takže nad výše uvedenými nedostatky lze zamhouřit oko.

**Shrnutí:** Práci jsem prostudoval, doporučuji ji k obhajobě a navrhuji klasifikovat „výborně“.

V Praze dne 23.05.2018

prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.  
ÚFCH VŠCHT Praha