

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

posudek vedoucího  posudek oponenta  
 bakalářské práce  diplomové práce

Autor/ka: Katarína Baxová

Název práce: Pairing of biologically relevant ions in aqueous solutions

Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika, Fyzika

Rok odevzdání:

Jméno a tituly vedoucího: prof. Mgr. Pavel Jungwirth, DrSc.

Pracoviště: UOCHB AV ČR

Kontaktní e-mail: pavel.jungwirth@uochb.cas.cz

## Odborná úroveň práce:

vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

téměř žádné  vzhledem k rozsahu přiměřený počet  méně podstatné četné  závažné

## Výsledky:

originální  původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

veliký  standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet  četné

## Celková úroveň práce:

vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

**Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího:**

Vzhledem k tomu, že práce je psaná anglicky, přikládám své vyjádření též v angličtině:

It is a pleasure for me to recommend the Ms. thesis of my student Katarína Baxová for defense and suggest excellent grade („výborně“).

Katarína started working in my group about three years ago and in the beginning I was not sure how it will go. She is not one of the super-self-confident students who radiate success on first encounter. When she came, she was quiet, shy, and insecure. Consequently, the start was not the fastest in the world, but slowly and surely she caught up, learnt not only how to do molecular simulations but also how to perform fluorescence microscopy experiments and, in the end, became an invaluable member of the team. Gradually, as she acquired knowledge and skills, she also gained self-confidence and is a different person (in the most positive sense of the word) than when she came.

When I now look back how much Katarína accomplished in the last years, I am myself surprised by the amount, quality, and diversity of work she has done. By her hard work she became an indispensable team member in three projects. One – she did her share of free energy ab initio molecular dynamics simulations of ion pairing of calcium with chloride in aqueous solution resulting in a paper and also a Cover Art in J. Chem. Phys. Two – Katarína helped significantly with calculations mapping a very unusual phenomenon – a contact like charge pairing of guanidinium cations – which we published in J. Phys. Chem. B. Three – Katarína was instrumental in preparing and measuring leakage of phospholipid vesicles by oligoarginines by fluorescence microscopy – the resulting manuscript on mechanistic aspects of cell penetrating peptides has just obtained positive reviews in PNAS and we are currently working on a minor revision.

In summary, I feel privileged having Katarína in my group and I look forward for continuation within her planned PhD. study and work with us.

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

Všechny dotazy jsme s Katarínou probrali během psaní diplomové práce.

**Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta:

V Praze 29. 8. 2018

