

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky :

Ondrej Gutten

Název práce:

Computer modelling of interactions of nitroaromatic compounds with nitroreductases

A. Bodové hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte právě jednu z možností)

1. Rozsah BP a její členění	
<input checked="" type="checkbox"/>	A - přiměřené, odpovídají charakteru BP a významu jednotlivých částí
<input type="checkbox"/>	B - nevyrovnané, členění není logické n. rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s jejich významem
<input type="checkbox"/>	C - uspokojivé, rozsah některých částí nedostačuje
<input type="checkbox"/>	N - nedostatečné

2. Odborná správnost	
<input checked="" type="checkbox"/>	A - výborná, bez závažnějších připomínek
<input type="checkbox"/>	B - velmi dobrá, s ojedinělými drobnými závadami (nejasnost výkladu, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo výsledků)
<input type="checkbox"/>	C - uspokojivá, s četnějšími drobnými závadami
<input type="checkbox"/>	N - nevyhovující, s hrubými chybami

3. Uvedení použitých literárních a j. zdrojů	
<input type="checkbox"/>	A - bez připomínek, všechny převzaté údaje s citací zdroje, celkový počet citací odpovídá charakteru práce
<input checked="" type="checkbox"/>	B - uspokojivé, s občasnými neobratnostmi zejm. v umístění odkazů, nebo s celkově nižším počtem citací
<input type="checkbox"/>	C - s vážnějšími závadami, např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky, nebo se ojediněle vyskytuje opominutí odkazu na zdroj převzatých dat
<input type="checkbox"/>	N - nevyhovující, velmi málo citací, ev. rysy plagiátu (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)

4. Jazyk práce	
<input type="checkbox"/>	A - výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb
<input type="checkbox"/>	B - velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby
<input type="checkbox"/>	C - upokojivý, četnější slohové neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby, ojediněle se vyskytují obtížně srozumitelné n. nejednoznačné formulace
<input type="checkbox"/>	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

5. Formální a grafická úroveň práce	
<input type="checkbox"/>	A - výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
<input checked="" type="checkbox"/>	B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu citací, překlepy, chybějící zkratky apod.
<input type="checkbox"/>	C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo četnějšími drobnými chybami
<input type="checkbox"/>	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

Případný slovní komentář k bodům 1. až 5. :

Ad 3. Ojedinelé nedostatky v pořadí citací (48/47, cit.52) a jejich charakteru (cit. 14 - "discovered" vs. webový "atlas", simulated annealing - wikipedia !) Metodická část (str. 18 až 27 prakticky bez citací - jsou formulace vlastní, na základě např. experimentování autora s programy, nebo převzaté z dokumentace (čemuž by nasvědčoval totožný formát)? Obecně si myslím, že si použité výpočetní metody zaslouhovaly podrobnější popis jak v přehledu literatury, (zde se autor zabýval především minimalizační strategií), tak v části metodické.

Ad 4. Nehodnoceno - anglický jazyk

Ad 5. Zařazení TAB 4 (výsledky str. 32) spíše do metod (souhrn použitých pdb filů), odkaz na Fig. 6 (na str. 37) by bylo vhodné doplnit odkazem na přísl. stranu (26), Fig. 7 je velmi málo informativní (graficky).

B. Obhajoba

Dotazy k obhajobě

1. V metodické části autor uvádí, že byly počítány "two types of charges" (Kollmanovy a Gasteigerovy). Jedná se skutečně o dva typy nábojů?
2. V pasáži o výběru vhodných pdb souborů hovoří autor o jeho omezení na "human isoforms", v přehledu použitých souborů v tab. 4 se žádné údaje tohoto typu nevyskytují. Kolik forem a jaké autor použil?
3. V úvodu se uvádí, že nitreniové kationty odvozené od 2-NBA a od 3-NBA se liší dobou života. Je z tohoto hlediska plně korektní postup použitý v práci (využití 2-NBA jako "templátu" pro 3-NBA)?
4. Jak by autor na základě svých zkušeností z předložené práce obecně hodnotil vyhlídky "docking", při němž by se vycházelo z volné formy enzymu (bez substrátu)?

Stanovisko k opravě chyb v práci:

opravný lístek/oprava v textu JE / NENÍ (zakroužkujte) podmínkou přijetí práce

C. Celkový návrh

Práci doporučuji k přijetí k dalšímu řízení: ANO / NE

Navrhovaná celková klasifikace

Datum vypracování posudku: 12. 9. 2008

Jméno a příjmení, podpis oponenta :

doc. RNDr. Jiří Hudeček, CSc.

