

POSUDEK BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

- Jméno a příjmení studenta:* Lucie Krohová
Studijní obor: Biofyzika a zdravotnická technika
Oponent bakalářské práce: Mgr. Zdeněk Chval, Ph.D.
Katedra: Laboratorních metod a informačních systémů
Název bakalářské práce: Software pro zobrazování molekulárních struktur
- Volba tématu:
1. Mimořádně aktuální
 2. Aktuální pro danou oblast
 3. **Užitečné a prospěšné**
 4. Standardní úroveň
 5. Neobvyklé
- Cíl práce a jeho naplnění:
1. **Vhodně zvolený cíl, který byl naplněn**
 2. Vhodně zvolený cíl, který byl částečně naplněn
 3. Vhodně zvolený cíl, který nebyl naplněn
 4. Nevhodně zvolený cíl
- Struktura práce:
1. Originální – zdařilá
 2. **Logická – systémová**
 3. Logická – tradiční
 4. Pro dané téma tradiční
 5. Pro dané téma nevhodná
- Práce s literaturou:
1. Vynikající, použity dosud neběžné prameny
 2. **Velmi dobrá, použity nejnovější dostupné prameny**
 3. Dobrá, běžně dostupné prameny
 4. Slabá, zastaralé prameny
- Vybavení práce (data, tabulky, grafy, přílohy):
1. Mimořádné, funkční
 2. Velmi dobré, funkční
 3. **Odpovídá nutnému doplnění textu**
 4. Nedostačující
- Přínosy bakalářské práce:
1. Originální, inspirativní názory
 2. Ne zcela běžné názory
 3. **Vlastní názor argumentačně podpořený**
 4. Vlastní názor chybí
- Uplatnění bakalářské práce v praxi a ve výuce:
1. **Práci lze uplatnit v praxi**
 2. **Práci lze uplatnit ve výuce**
 3. Vhodná pro publikování
 4. Práci nelze příliš využít ani v praxi ani při výuce
- Formální stránka:
1. Výborná
 2. Velmi dobrá
 3. **Přijatelná**
 4. Nevyhovující

- Jazyková stránka:
1. Stylistika a) výborná
b) velmi dobrá
c) dobrá
d) nevyhovující
 2. Gramatika a) výborná
b) velmi dobrá
c) dobrá
d) nevyhovující

Zásadní připomínky k bakalářské práci:

- 1. nemám**
2. mám tyto:

.....
.....

Další hodnocení:

Předkládaná bakalářská práce se zabývá studiem funkčnosti programů pro zobrazování molekulových struktur. Studovány jsou programy DS ViewerPro 5.0, DS Visualizer 3.0, VMD a Rasmol. Po stručném úvodu zaměřeným především na historii molekulového zobrazování a přehledu používaných formátů je práce pojata především jako přehledný manuál ke studovaným programům. Zde vidím hlavní přínos této práce, protože by mohla dobře posloužit v prvotní orientaci všem studentům, kteří se chtějí věnovat molekulovému modelování. V závěru studentka provedla se všemi programy několik modelových operací a programy porovnávala.

Práce má některé formální nedostatky, např. citace jsou uvedeny duplicitně, některé obrázky jsou poněkud nečitelné a asi by si zasloužily lepší popisky než ty, které jsou uvedeny v příloze. U modelových úloh není jasný původ studovaných molekul (poly)alaninu a myoglobinu. Je zde také několik nepřesností, např. v popisu funkce „Show by radius“ na str. 43 nebo funkce „Temperature“ na str. 61. Přes tyto výhrady práce určitě splnila svůj účel a navrhuji ji k obhajobě.

Práce splňuje základní požadavky kladené na tento typ prací, a proto ji doporučuji k ústní obhajobě:

- 1. ano**
2. ne

- Navrhovaná klasifikace:
1. výborně
 - 2. velmi dobře**
 3. dobře
 4. nevyhověl

Otázky k ústní obhajobě práce:

1. V práci jste porovnávala dvě konformace myoglobinu. Je možné v použitých programech vypočítat hodnotu RMSD?
2. Za nejlépe vybavený program považujete VMD, ale jako uživatelsky nejprátelejší doporučujete DS Visualizer 3.0. Lišila by se Vaše doporučení, kdybyste se věnovala pouze studiu velkých makromolekul (např. terciární struktury proteinů) nebo naopak pouze studiu malých systémů o maximálně desítkách atomů?

Datum: 1.června 2011

Podpis oponenta bakalářské práce.....