

Posudok na diplomovú prácu Bc. Žofie Sovovej „Aplikace kvantově chemických metod a molekulárně dynamických simulací na reálné biologické systémy“

V predkladanej práci sa autorka zaoberá dvomi oblasťami výskumu. Väčšia časť je venovaná ústrednej časti fotosystému (jadro fotosystému a membrána, v ktorej je systém vnorený) a menšia zaoberajúca sa tryptofánovým represorom. Obe sú to oblasti, ktoré sú z veľkej časti neznáme a vyžadujúce množstvo skúmania.

Na začiatku práce autorka prehľadne zhrnula vedomosti o skúmaných systémoch, ako aj o metódach, používaných pri práci (homologické modelovanie, MD simulácie, *ab initio* výpočty). Následne uvádza parametry simulácií, použité silové polia pri simuláciách atď.

Vo výsledkoch ako aj v diskusii je prevažná časť venovaná fotosyntetickej membráne. Pravdepodobne na tomto systéme autorka spravila najviac práce (vytvorenie parametrov glykolipidu pre silové pole, následné postavenie membrány a jej ekvilibrácia aby zodpovedala experimentálne zisteným údajom). V tomto treba oceniť autorku, že sa jej podarilo vyrovnat' sa aj s veľkým množstvom vodíkových väzieb v hlavičkách glykolipidov, pretože ako uvádza, tak membrána svojimi parametrami zodpovedá experimentálnym hodnotám a je stabilná. V jadre fotosystému II, ktorý nadväzuje na predchádzajúcu prácu na pracovisku, došlo o rozšírenie modelovaných proteínov zo 4 na 13. Pri týchto proteínoch sa spravilo len homologické modelovanie a energetická minimalizácia programom Modeller. Aj keď sa tento systém nedá simulovať samotný bez membrány. Posledným skúmaným systémom bol tryptofánový represor, kde bol na základe kryštalickej štruktúry postavený model a uskutočnená MD simulácia za účelom zistenia väzbových energií rôznych ligandov.

V práci som si všimol niekoľko preklepov ako v kapitole 2.2 sa tvrdí, že sacharidy majú hydrofóbne vlastnosti alebo pri popise hexagonálnej H1 fázy membrány sa uvádzajú aj hydrofilné aj hydrofóbne časti lipidov na okraji valca. Prítom okolitý text uvádza správne informácie a podporuje domnienku, že je to len preklep.

K práci mám nasledovné pripomienky:

- v kapitole 3.2 je spomínaný skript *killwater* na odstránenie molekúl vody z prostrednej časti membrány, pričom mi nie je známy žiadny programový balík, ktorý by takýto skript obsahoval;
- v kapitole 3.3 bola aká metóda použitá na obmedzenie nekonečného pôsobenia síl? PME alebo niečo iné? Pretože súčasná produkčná verzia Gromacs-u nedokáže pri použití PME správne počítať väzbové energie; za predpokladu, že PME, tak by to mohol byť dôvod divných výsledkov;
- v kapitole 3.4 sú na začiatku spomínané 2 vyššie rastliny, ale menovite je spomínaný len hrach a až neskôr v texte je spomínaný aj špenát (bez presného druhového označenia);
- v kapitole 4.1 by pri grafoch 1, 2 a 3 nebolo zle ukázať aj „running-averages“ hodnoty, aby bol vidieť lepšie trend vývoja;
- v kapitole 4.1 sa na obrázku 4 nachádza po krajoch membrány voda, ktorá neviem, ako sa tam dostala a ktorá by tam nemala byť. Môže to autorka nejak vysvetliť?
- v práci autorka naznačuje, že umiestnenie jadra FSII nie je triviálnou operáciou. Mohla by objasniť očakávané komplikácie a aspoň načrtnúť predpokladaný spôsob vloženia?

Aj napriek týmto pripomienkam, ktoré neznižujú kvalitu práca, si myslím, že práca je prínosná a pretože sa zaoberá veľkými a komplikovanými systémami, nie je možné očakávať, že by autorka objasnila celú ich funkčnosť. A konštatujem, že predložená práca Žofie Sovovej spĺňa požadované kritériá na diplomové práce, doporučujem na prijatie na obhajobu a po úspešnej obhajobe navrhujem známku *veľmi dobre*.