



Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
ÚSTAV FYZIKÁLNÍ BIOLOGIE

Zámek 136

373 33 Nové Hradky

DIČ 60076658

České Budějovice, 5.6.2008

Vyjádření školitele k diplomové práci bc. Žofie Sovovové

Téma diplomové práce: Aplikace kvantově chemických metod a molekulárně dynamických simulací na reálné biologické systémy

Předkládaná diplomová práce se zabývá aplikací moderních výpočetních metod molekulárního modelování na studium reálných biomolekulárních systémů. Výpočetní studie vycházejí z experimentů našeho pracoviště, jež studuje strukturu a funkci tryptofanového represoru a membránový pigment-proteinový komplex fotosystému II (PSII).

Se základními nástroji molekulového modelování, především molekulárně dynamickými simulacemi, byla diplomantka dostatečně obeznámena již v předchozím projektu v rámci její úspěšné bakalářské práce, což pozitivně ovlivnilo řešení časově i výpočetně náročného projektu.

Během poměrně krátkého období diplomantka zvládla parametrizaci silového pole pro glykolipidy fotosyntetické membrány s použitím kvantově chemických výpočtů a implementovala tyto parametry do molekulárně dynamického programu Gromacs. Dále se zabývala konstrukcí homologního modelu jádra fotosystému II z hrachu (*Pisum sativum*), který bude použit pro následná teoretická studia. Výsledky diplomové práce budou uvedeny také v odborné publikaci, kterou studentka momentálně připravuje.

Vyjádření školitele k plnění povinností individuálního studijního plánu:

Diplomantka absolvovala veškeré přednášky i cvičení podle předepsaného studijního plánu. Průběžné výsledky diplomové práce diplomantka každoročně prezentovala formou přednášky na odborném semináři katedry. Studentka se aktivně zapojila do výuky v rámci cvičení základního kurzu Bioinformatika a každoročně se podílela na vedení výzkumného projektu v rámci letních studentských kurzů pořádaných na UFB JU v Nových Hradech.



Kontakt: Sekretariát ÚFB – Marcela Pokorná, Zámek 136, 373 33 Nové Hradky, tel: 386361259

fax: 386361219, mobil: +420777729585, e-mail: pokorna@greentech.cz, web: www.greentech.cz

Bankovní spojení: ČSOB, Hroznova 1, 370 01 České Budějovice, č.ú.: 166404099/0300



Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ BIOLOGIE

Zámek 136

373 33 Nové Hrady

DIČ 60076658

Na závěr hodnotím diplomovou práci svým rozsahem i kvalitou zpracování jako práci standardní. Oceňuji její přehlednost, grafickou úpravu a minimum formálních nedostatků. Lze konstatovat, že diplomantka obohatila výzkum na pracovišti o nové teoretické přístupy a výpočetní nástroje a jejich aplikací prokázala tvůrčí schopnosti samostatně pracovat na vědecky zajímavém projektu. Studentka tímto splnila požadavky na řádné ukončení magisterského studia, a proto ji bez výhrad doporučuji k obhajobě diplomové práce.

Datum a podpis školitele:

5.6.2008

..... **Mgr. Michal Kutý, Ph.D.**



Kontakt: Sekretariát ÚFB – Marcela Pokorná, Zámek 136, 373 33 Nové Hrady, tel: 386361259

fax: 386361219, mobil: +420777729585, e-mail: pokorna@greentech.cz, web: www.greentech.cz

Bankovní spojení: ČSOB, Hroznova 1, 370 01 České Budějovice, č.ú.: 166404099/0300