

# Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- |  |  |
|--|--|
| <input type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input checked="" type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input type="checkbox"/> bakalářské práce  | <input checked="" type="checkbox"/> diplomové práce  |

Autor/ka: **Bc. Hana Barvíková**

Název práce: "**Studium interakcí organické hmoty a jejích složek pomocí molekulární dynamiky**"

Studijní program a obor: **Biofyzika**

Rok odevzdání: **2014**

Jméno a tituly oponenta: Zdeněk Chval, Mgr., Ph.D.

Pracoviště: ZSF JU

Kontaktní e-mail: chval@jcu.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 oponenta:

Předložená diplomová práce je součástí širšího projektu zabývajícího se adsorpcí organické hmoty s minerálními povrchy. Konkrétně se zabývá studiem adsorpce slabých organických kyselin, kyseliny benzoové, kyseliny o-salicylové a fenolu, resp. jejich konjugovaných bází na povrchu křemíku při různých hodnotách pH. Je psána v českém jazyce a má rozsah 69 stran. V první části je podrobně popsána metodika nutná ke zvládnutí simulací v programu Gromacs včetně nutné parametrizace silového pole, druhá část se věnuje vlastním výsledkům. Autorka zvolené systémy počítala metodou standardní molekulové dynamiky a taktéž méně obvyklou metodou potenciálu střední síly, která umožňuje vypočítat hodnotu volné energie, kterou jsou molekuly vázány k povrchu.

Z formálního hlediska nelze diplomové práci v podstatě nic vytknout- snad kromě překlepu ve vzorci 3.16 na str.27 a určité nejednotnosti v citacích, kdy některé časopisy jsou uvedeny ve zkratce, jiné plným názvem. Rovněž bych si rozmyslel, zda použít slovo „inkludovat“ na str.29. Pro systém fenol/fenolát v simulaci maximálního reálného počtu molekul při pH = 7,5 bych možná uvažoval o poměru 79:3 místo 82:0, což by asi lépe odráželo procentuální zastoupení obou forem při tomto pH.

Závěrem lze konstatovat, že studentka zvládla velice dobře svěřené téma a práci mohu doporučit k obhajobě.

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

- 1) Bylo by možné odhadnout na základě dostupných experimentálních dat hmotnostní koncentrace Vámi zvolených stavebních molekul v organické hmotě?
- 2) Ve Vašich výsledcích si vzájemně neodpovídají potenciály střední síly s radiálními distribučními funkcemi pro systém fenol- křemík a povrchy o povrchové hustotě náboje  $-0,03$  a  $-0,06 \text{ C.m}^{-2}$ . Nebylo by možné vyzkoušet nějaké polarizovatelné silové pole pro tyto simulace?
- 3) V práci jsou důsledně rozlišovány obě formy konjugovaného páru fenol-fenolát. Vzhledem k tomu, že v reálných roztocích existuje mezi těmito formami dynamická rovnováha, mohla byste porovnat souhrnné radiální distribuční funkce systému fenol/fenolát pro různě nabitě povrchy?

### Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

České Budějovice, 21.5.2014



# Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- |  |  |
|--|--|
| <input type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input checked="" type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input type="checkbox"/> bakalářské práce  | <input checked="" type="checkbox"/> diplomové práce  |

Autor/ka: **Bc. Hana Barvíková**

Název práce: " **Studium interakcí organické hmoty a jejích složek pomocí molekulární dynamiky**"

Studijní program a obor: **Biofyzika**

Rok odevzdání: **2014**

Jméno a tituly oponenta: **Mgr. David Řeha, Ph.D.**

Pracoviště: **ÚNSB, CVGZ AVČR, Nové Hrady**

Kontaktní e-mail: **reha@nh.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/oponenta:

Předložená diplomová práce má 69 stran a je psána v českém jazyce. Autorka v ní studuje interakci několika vybraných organických aromatických molekul s různě nabitým (při různých pH) povrchem křemene pomocí metod molekulární dynamiky. Vybrané organické molekuly byly modelem, reprezentujícím typickou organickou hmotu nacházející se v životním prostředí. Cílem práce bylo jednak připravit parametrické modely pro studované organické molekuly, studium jejich interakcí v homogenním prostředí a studium jejich interakcí s křemenným povrchem, hlavně jejich adsorpčních geometrií a energií.

Po obsahové stránce práce splnila vytyčené cíle. Autorka zvládla parametrizaci organických molekul pro silové pole OPLS a přípravu topologických souborů. Dále prokázala znalosti při přípravě simulačních boxů s povrchy, kdy použila křemíkový povrch s modifikovaným silovým polem ClayFF převzatým z prací O.Kroutila, které je uzpůsobeno pro simulace s různě nabitým (při různých pH) křemenným povrchem. Dále dokázala pochopit a uplatnit poměrně náročnou metodu potenciálu střední síly (PMF) pomocí „umbrella sampling“. Nakonec autorka také zvládla analýzu MD simulací s povrchy, včetně výpočtu hustotních profilů a radiálních distribučních funkcí.

Po formální stránce je práce celkem rozumně členěná, ikdyž v kapitole výsledky bych dal výsledky pro fenol, fenolát i jejich směs do jedné souhrnné podkapitoly. Rovněž bych kladně ohodnotil poměrně detailně popsaný postup při práci s programem GROMACS, který se spíše podobá tutoriálu, ikdyž bych ho vložil spíše jako dodatek za poslední kapitolu.

Předložená práce má ale také nedostatky. Diskuze výsledků u jednotlivých organických molekul (v kapitole Výsledky) mi přijde velmi stručná. Autorka v ní nediskutuje některé zajímavosti svých výsledků, jako např. proč je na *Obr 8* u neutrálního povrchu výrazný pík na pravé straně (v úrovni druhého povrchu). Chybí mi zde také podrobnější diskuze a výsledky o vzájemných interakcích organických molekul v homogenním prostředí, jejichž studium je vytyčeno jako jeden s cílů diplomové práce.

Další výrazný nedostatek vidím v kapitole 3.4 při popisu výpočtu nábojů atomů. Popis je velmi zmatený a zvláště pak v kombinaci s textem pod *Obr 4* nedává moc smysl (připadá mi, jako by ten text pod *Obr 4* byl jen nepřesně přepsán z reference [90]), navíc není jasné, jakou kvantovou metodu pro výpočet nábojů autorka použila (jestli AM1, DFT atd.). Dále pak tady autorka používá reference jako internetové odkazy na článek přímo u vydavatele či manuál programu AMBER (tyto odkazy mohou být brzo nefunkční) místo bibliografických odkazů na původní články.

V práci také vidím nedostatky ve formální a grafické úpravě. Na *Obr 1* atomy kyslíku O<sub>s</sub> vypadají jako atomy vodíku, což je velmi matoucí. Na grafech (v kapitole Výsledky) hustotních profilů, radiálních distribučních funkcí a PMF jsou křivky pro povrch 0,00 Cm<sup>-2</sup> a -0,12 Cm<sup>-2</sup> vyznačeny velmi podobnou barvou (červená, magenta) a je velmi těžké je v grafu od sebe odlišit.

I přes výše uvedené nedostatky hodnotím tuto práci příznivě a doporučuji k obhajobě.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Rád bych poprosil autorku a objasnění strategie výpočtu atomových nábojů u zkoumaných organických molekul. Jaká kvantově chemická metoda byla použita pro výpočet MEP? Byla použita metoda z reference [90]? Pokud byly pro QM výpočet použity semiempirické metody (jako AM1), take jaký je důvod (DFT či HF výpočty nejsou pro tak malé molekuly nákladné) ?

2. V závěru autorka píše, že nepozorovala žádné interakce mezi organickými molekulami či jejich interakci s ionty v homogenním prostředí. Jak došla k tomuto závěru? Byly provedeny simulace bez přítomnosti povrchů, či vycházela ze simulací s křemennými povrchy? Byla provedena analýza pomocí radiální distribuční funkce nebo něco podobného?
3. Poprosil bych autorku o diskuzi k Obr 8. Čím je způsobený výrazný pik vpravo u neutrálního povrchu? Je to nějaký artefakt výpočtů? V kapitole 4.3 autorka správně uvedla, že simulace s více zkoumanými molekulami poskytují statisticky přesnější data než simulace s jednou zkoumanou molekulou. Jak zajistit statisticky přesnější data i pro simulace s jednou zkoumanou molekulou?

### Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: V Nových Hradech, 20.5.2014



Mgr. David Řeha, Ph.D.



