

Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce 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 vedoucího: doc. RNDr. Milan Předota, Ph.D.

Pracoviště: Ústav fyziky a biofyziky PřF JU

Kontaktní e-mail: predota@prf.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 vedoucích:

Hana Barvíková ve své diplomové práci navazuje na svou bakalářskou práci, ve které se seznámila s používáním programu Gromacs pro modelování interakcí molekul na rozhraní minerální povrch–kapalina. V diplomové práci:

- a) použila modifikované silové pole pro křemenný povrch
- b) použila odlišné uspořádání simulačního boxu – dva identické povrchy
- c) připravila topologie dalších organických molekul (kvantově spočtené parciální náboje dodal B. Minofar)
- d) modelovala systémy obsahující více molekul – až do počtu v souladu s experimentální rozpustností, resp. systémy obsahující různě protonované stavy molekul dle daného pH
- e) seznámila se s metodou výpočtu volné energie pomocí potenciálu střední síly a použila ji pro získání profilů volné energie molekul jako funkce vzdálenosti od povrchu.

Zejména poslední cíl považuji za zásadní pokrok oproti bakalářské práci, neboť se jedná o postup mně teoreticky známý, ale s jehož implementací jsem neměl zkušenosti. Slečna Barvíková samostatně vyřešila přípravu série počátečních konfigurací i následné zpracování výsledků série simulací potřebných pro získání profilu volné energie a sepsala potřebné kroky tak, aby sloužily jako návod pro úspěšné používání metody v obdobných systémech.

Jednou z hlavních motivací pro použití metody výpočtu střední síly působící na molekulu upoutanou v dané vzdálenosti od povrchy bylo získat statisticky přesnější data než z hustotních profilů, které v řadě případů i z dlouhých simulací stále vykazují značný šum, vzniklý zejména slabou interakcí molekul s křemennými povrchy. Porovnání hustotních profilů přímo určených ze simulací s profily volné energie a z nich spočítaných hustotních profilů odhalilo značné rozdíly mezi nimi, jejichž příčinou může být a) statistická nepřesnost určení jednoho nebo obou typů profilů b) rozdíl mezi interakční energií a volnou energií, role entropie. Vzhledem k tomu, že tyto výpočetně náročné simulace byly dokončeny krátce před dokončením diplomové práce, nebylo možné aspoň pro jednu kombinaci molekula-povrch výrazně prodloužit délku simulací, provést simulace za jiné teploty či jinak vnést více světla do závěrečné diskuse výsledků. Toto považuji za jeden z mála, ale bohužel významný nedostatek práce.

Studované systémy a celá diplomová práce jsou součástí řešeného projektu GA ČR “Počítačové modelování interakcí organické hmoty a biomolekul s minerálními povrchy” (2013-2016), ve kterém H. Barvíková figuruje jako studentka-členka řešitelského týmu. Pro publikování výsledků bude nutné prodloužit výpočetní časy a lépe objasnit vztah výsledků obou metod. Jako méně vhodná volba se v průběhu řešení ukázalo mé doporučení použít jako referenční bod karboxylové skupiny těžiště polohy obou kyslíků - výsledná analýza ukázala, že zvolit jako referenční bod jeden z těchto kyslíků je sice statisticky přesnější, ale pro analýzu interakčních energií vhodnější volba. Jeden z původních doplňkových cílů, tj. studovat interakce molekul i s rutilovým povrchem nemohl být naplněn - jednak by objem práce přesáhl rozumnou míru a hlavně jsme dosud nepřevedli používané silové pole rutilového povrchu do programu Gromacs (potíže s periodickými kyslíkovými můstky).

Po stránce zpracování diplomové práce oceňuji čtivé shrnutí potřebných znalostí pro přípravu a modelování systémů a instruktivní návod, jak provádět a zpracovat výsledky simulací včetně získání profilů volné energie. Studentka rozvedla také část věnovanou volbě kombinací parametrů povrchů a molekul tak, aby simulované podmínky byly vnitřně konzistentní a v souladu s experimentálními daty. Studentka prokázala, že je schopna řešit nejen složitější úkoly, ale navíc s vysokou mírou samostatnosti - od práce s literaturou po provádění simulací a jejich zpracování.

Ve svém posudku jsem se soustředil spíše na část práce, která z pohledu vědeckého projektu vyžaduje dopracování. Je však třeba vyzdvihnout, že diplomová práce H. Barvíkové významně pomohla členům řešitelského týmu projektu k nalezení/otestování vhodných přístupů studia interakcí molekul s povrchy včetně technické realizace v programu Gromacs, připravila modely

molekul pro další zkoumání a sepsala práci, která je výborným návodem pro další následovníky. Společně s vědomím velikého času (lidského i výpočetního), který práci věnovala, se přikláním k hodnocení "výborně".

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: Č. Budějovice, 21. 5. 2014



