

Posudek práce
předložené na Přírodovědecké fakultě JU

☐ posudek vedoucího ☒ posudek oponenta
☒ bakalářské práce ☐ diplomové práce

Autor: Matyáš Suchý
Název práce: Molekulární simulace proteinů
Studijní program a obor: Biologie
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Mgr. Tomáš Fessler, Ph.D.
Pracoviště: Katedra chemie
Kontaktní e-mail: fessler@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 oponenta:

Ve své bakalářské práci se Matyáš Suchý zaměřil na zpřístupnění molekulárních simulací proteinů v GROMACSu a v AMBERu pro studenty nefyzikálních oborů. Popisuje zde všechny základní kroky, se kterými se vědec setká při simulaci proteinů. V práci pokrývá základy práce v linuxu, orientaci v PDB databázi proteinových struktur, ukázky vizualizace struktur, parametrizaci, samotnou simulaci a základní analýzu simulovaných trajektorií.

Práce je psaná v češtině, je velmi dobře prezentovaná, má standardní rozsah, strukturu a dělení a vzhledem k rozsahu neobsahuje příliš mnoho překlepů ani formálních chyb. Je psaná srozumitelnou formou. Pochopení jednotlivých kroků je usnadněno díky mnohým příkladům na molekule aktinu a ukázkou použitého kódu.

Konstatuji, že práce svůj záměr splnila a rád ji využiji pro úvod do simulací pro česky mluvící studenty v naší laboratoři. I když práce neprezentuje vědecký objev, samotné osvojení úvodu do simulací ve dvou simulačních prostředích považuji za výborný vstup do magisterského projektu, kde student zúročí nabitě znalosti při samostatné vědecké práci.

Práci doporučuji práci k obhajobě a hodnotím ji stupněm výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

V práci jsem nenašel zmínku o CHARMM-GUI. Vzhledem k tomu, že je cílená na nováčky v poli simulací, považoval bych za vhodné tento balík představit, mnohým by mohl usnadnit začátek a ušetřit mnoho času.

Práci

☒ doporučuji

☐ nedoporučuji

uznat jako bakalářskou/diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

☒ výborně ☐ velmi dobře ☐ dobře ☐ neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: