



MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA
Univerzita Karlova

Zápis o části státní závěrečné zkoušky Obhajoba diplomové práce

Akademický rok: 2022/2023

Jméno a příjmení studenta: Bc. Pavol Šimko
Identifikační číslo studenta: 81766679

Typ studijního programu: navazující magisterský
Studijní program: Matematické a počítačové modelování ve fyzice
ID studia: 672829

Název práce: Počítačové modelovanie membránových proteínov
Pracoviště práce: Fyzikální ústav UK (102. • 32-FUUK)
Jazyk práce: slovenština
Jazyk obhajoby: čeština
Vedoucí: RNDr. Ivan Barvík, Ph.D.
Oponent(i): doc. RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.
Datum obhajoby: 02.02.2023 **Místo obhajoby:** Praha
Termín: řádný

Průběh obhajoby: Student představil téma své práce. Práci motivoval snahou porozumět funkci a dynamice proteinů v membránách buňky. Dále představil použité metody molekulární dynamiky. Poté ukázal konkrétní výsledky pro tři systémy: pro natahování řetězce dekaalaninu, pro receptor v komplexu s kofeinem a pro simulace membránových kanálů. Nakonec shrnul výsledky pro chování volné energie a určené bariéry pro změny konformací molekulárních systémů.

Školitel a oponent přečetli své posudky. Student pak odpovídal na otázky oponenta s použitím připravené prezentace. Oponent byl s prací i odpovědí velice spokojen. V následné diskusi se ptal doc. Kružík na srovnání s experimenty či s jinými simulacemi a zda bude práce publikována, školitel komentuje, že originálních výsledků k publikaci je dost. Dr. Průša se ptal co je konkrétně technický přínos studenta a co je použití hotového software. Student rovněž zodpověděl anglicky otázku hosta dr. Allolia. Student reagoval na dotazy živě a s porozuměním.

Výsledek obhajoby:	výborně (1)	
Předseda komise:	doc. RNDr. Martin Čížek, Ph.D.
Členové komise:	prof. RNDr. Josef Málek, CSc., DSc.
	Mgr. Vít Průša, Ph.D.
	prof. RNDr. Vít Dolejší, Ph.D., DSc.
	doc. RNDr. Iveta Hnětynková, Ph.D.
	doc. RNDr. Martin Kružík, Ph.D., DSc.
	doc. Mgr. Milan Pokorný, Ph.D., DSc.