

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

posudek vedoucího
 bakalářské práce

posudek oponenta
 diplomové práce

Autor/ka: **Jakub Dostál**

Název práce: **Molekulárně-dynamické simulace analog nukleových kyselin**

Studijní program a obor: **Fyzika, obecná fyzika**

Rok odevzdání: **2006**

Jméno a tituly oponenta: **Prof. RNDr. Josef Štěpánek, CSc.**

Pracoviště: **Fyzikální Ústav MFF UK, Ke Karlovu 5, Praha 2, 121 16**

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

Použité metody:

nestandardní standardní obojí

Aplikovatelnost:

přínos pro teorii přínos pro praxi bez přínosu nedovedu posoudit

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:

Cílem předložené bakalářské práce bylo seznámení studenta s problematikou molekulárně-dynamických simulací (MDS) biomolekul a použití této metodiky pro získání základních informací o strukturní stabilitě „kissing“ komplexu zkrácené „NMR“ smyčky TAR₁₆ a aptameru TAR₁₆* a vlivu modifikace kritické internukleotidové spojky na TAR₁₆* smyčce mezi U⁵ a U⁶ vložení CH₂ skupiny. Pro získání přímé praktické zkušenosti a rovněž pro ověření správného pochopení algoritmů molekulárně-dynamických simulací bylo z jedním z úkolů bakalářské práce vytvoření vlastního programu pro simulaci systému argonových atomů, jejichž interakce je určena Lennardovým-Jonesovým potenciálem.

Předložená bakalářská práce představuje poměrně obsáhlý odborný text (39 stran + přílohy), kde autor v rešeršních částech 1 až 3 ukazuje, že dobře porozuměl jak problematice struktury nukleových kyselin a speciálně detailům struktury TAR smyčky (významný řídicí útvar RNA HIV), tak základním principům používaným při molekulárně-dynamických simulacích. Dále je zde popsán vytvořený program na MDS atomů argonu. Těžištěm práce je výsledková část zabývající se MDS komplexu TAR₁₆/TAR₁₆*. Pan Dostál zcela jistě splnil všechny zadané úkoly a předložil práci, která nepochybně překračuje požadavky na bakalářskou práci kladené. Následující připomínka a níže uvedené dotazy jsou proto míněny jako upozornění, která by mohla být využita, pokud by pan Dostál v této problematice pokračoval i v rámci magisterského studia:

- Vytvořený program na MDS atomů argonu je dokumentován v příloze, ale jeho funkce a výsledky testování jsou popsány jen ve velmi hrubých rysech. Jediným prezentovaným výstupem je obrázek 4.1., který má představovat srážku atomu argonu s argonovým klastrem. Není jasné jak byl nastaven počáteční stav systému (počet argonových atomů a jejich rozložení), jak dlouhá trajektorie je zobrazena, jaké byly podmínky simulace (tlak, teplota), nebo jak se vůbec může rozlišovat argonový atom (zeleně) a argonový klastr.

Závěrem chci shrnout, že se jedná o velmi hodnotnou bakalářskou práci.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Jaké kationty byly použity při simulaci komplexu TAR smyčky? Bylo zjištěno, že by se některý kationt lokalizoval ve speciální poloze, která by mohla být významná pro stabilizaci komplexu?
- Existuje korelace mezi fluktuacemi geometrie U⁵/A¹² páru a změnami geometrie sousedního bázového páru na krčku TAR₁₆*?
- Podle obrázku 4.11 byla výchozí geometrie komplexu při simulaci modifikované TAR₁₆* smyčky jiná než u smyčky nemodifikované (jiný sklon os krčků). Proč tomu tak bylo a není to na závadu při srovnávání výsledků simulací?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako **bakalářskou**.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

V Evry u Paříže, dne 15.června 2006

Prof. RNDr. Josef Štěpánek, CSc.