

Posudek oponenta diplomové práce

Autor práce: Bc. Filip Černý

Název práce: Konformace cukrfosfátové páteře a deoxyribózy v protein-DNA komplexech.

Kritérium hodnocení	Dílčí hodnocení**						
	A	B	C	D	E	F	nelze hodnotit
Celkový rozsah práce, vyváženost jednotlivých částí, struktura	x						
Kvalita teoretické části (množství poznatků z literární rešerše a jejich zpracování)	x						
Výstižnost formulace základního problému a cílů práce	x						
Logika postupu při vlastní rešeršní nebo experimentální práci	x						
Úplnost popisu použitých metodik a postupů		x					
Úroveň zpracování výsledků (grafy, tabulky, fotografie)			x				
Úroveň legend obrázků a tabulek (správnost, srozumitelnost a úplnost)	x						
Adekvátnost interpretace výsledků	x						
Způsob diskuse, začlenění do kontextu výzkumu na pracovišti a ve světě	x						
Výstižnost souhrnu	x						
Jazyková a stylistická úroveň, názvosloví	x						
Správnost citací použité literatury (citace v textu a v seznamu, jednotný styl, oficiální zkratky časopisů)	x						
Navrhovaná známka***:	A/B *						

Poznámky:

* Nehodící se škrtněte / vymažte.

** Hodnocení křížkujte.

*** Výsledná známka nemusí být průměrem známek dílčích.

Komentář k práci, připomínky a dotazy.

Předložená diplomová práce se zabývá studiem komplexů DNA a proteinu ve dvou silových polích, se zaměřením na stabilitu různých forem DNA. Práce je strukturovaná logicky, s jasně vytyčeným cílem, kterého dosahuje, a s nepatrným množstvím stylistických a gramatických chyb.

K práci mám tyto komentáře:

V seznamu zkratek nejsou uvedeny zkratky silových polí, což by se hodilo minimálně u těch hlavních (bsc0/bsc1, OL15).

V sekci Materiál a metody chybí citace použitých software, a řada detailů simulace (typ barostatu, termostatu, minimalizačního algoritmu, silové pole použité pro protein, zvolený model vody, případně specifické parametry pro ionty, pokud byly použity). Moje otázka k této sekci se týká protonačního stavu histidinů – autor práce uvádí, že byl zvolen na základě pH roztoku použitého při přípravě krystalů. Jaké bylo toto pH pro jednotlivé komplexy a vyskytnul se díky němu v některých strukturách dvojitě protonovaný histidin (HIP)? Tvořil nějaký z histidinů zřetelnou vodíkovou vazbu s navázanou DNA?

V grafu č. 1. je křivka RMSD samotného proteinu totožná pro obě silová pole. Může autor okomentovat tento fakt, případně, pokud se jedná o chybu při tvorbě grafu, ukázat správnou verzi?

Srozumitelnosti práce by pomohly obrázky jednotlivých protein-DNA komplexů, ať už v Úvodu při popisu jednotlivých proteinů, v Materiálech a metodách při popisu úprav jednotlivých krystalových struktur, nebo ve Výsledcích, při popisu stability systému. Při jejich absenci je například popis residuů v interakci s DNA, nutných úprav struktur před simulací, nebo možných pohybů proteinu pro čtenáře poměrně abstraktní.

Vzhledem k tomu, že schopnost dělat přehledné obrázky studovaných struktur je relativně zásadní v celém poli *in silico* molekulární biologie, navrhuji udělit známku A v případě, že autor práce v rámci obhajoby ukáže (ať už startovní, nebo finální) struktury studovaných protein-DNA komplexů.

Závěr: práci **doporučuji** k obhajobě.

V Olomouci dne
12.5. 2022

Jméno oponenta, podpis
Mgr. Petra Čechová, Ph.D.

Poznámky:

* Nehodící se škrtněte / vymažte.

** Hodnocení křížkujte.

*** Výsledná známka nemusí být průměrem známek dílčích.