

Posudek oponenta na bakalářskou práci

Studijní program:	Chemie
Studijní obor:	Aplikovaná chemie
Student:	Elizabeth Kolářová
Název práce:	Minoritní stavy páteře B-DNA a jejich vliv na interakci s proteiny
Vedoucí práce a jeho pracoviště:	doc. RNDr. Petr Jurečka, Ph.D., Katedra fyzikální chemie, PřF UP
Oponent práce:	Mg. Marie Zgarbová, Ph.D.
Relevance teoretické části (zaměření k tématu, kvalita citací):	B
Formální stránka (např. reference, jazyk, překlepy):	B
Grafická úroveň (vlastní obrázky, grafická prezentace závislostí, tabulky):	B
Vyhodnocení a interpretace výsledků (statistické zpracování, kvalita diskuze):	A
Samostatnost a iniciativa (jen vedoucí):	

Připomínky a komentáře k práci:

Na předložené bakalářské práci je patrné, že si autorka osvojila práci s biomolekulami protein-DNA komplexů a metodou molekulové dynamiky. Výsledky jsou v práci náležitě zpracovány, diskutovány a jsou vyvozeny důležité a užitečné závěry.

Práce samotná by si, dle mého názoru, zasloužila autorčino důkladnější přečtení a upřesnění některých vět, zejména v teoretické části. Pozornost by si zasloužily citace, hlavně jejich formát. Práci by rovněž obohatilo větší množství vlastních obrázků, oproti převzatým a lepší prezentace vlastních grafů (v obrázcích 24-34 jsou jen velmi těžko rozlišitelné odstíny některých barev, rovněž u počátečního bodu není jasné, ke kterému úhlu patří).

K práci mám následující dotazy:

1. Autorka se ve své práci zaměřila na dvě NtC třídy, BB12 a BB15, o kterých uvádí, že patří mezi nejčastěji zastoupené nekanonické konformery. Jaké je tedy procentuální zastoupení těchto konformerů v databázi krystalových struktur?
2. V předložené práci je stabilita MD simulací posouzena na základě analýzy RMSD (zvlášť proteinu a DNA) a B-faktorů proteinu. Bylo analyzováno také samotné rozhraní protein-DNA komplexu? Zůstávají v simulacích stabilní nativní kontakty mezi proteinem a nukleovou kyselinou?
3. Při studiu stability konformeru BB12 byl použit komplex (1T9I), kde jsou studované dinukleotidy v blízkosti dvou vápenatých iontů. Jak se chovaly tyto ionty v průběhu simulace? Ovlivnila přítomnost těchto iontů stabilitu konformeru BB12 ve studovaném komplexu?

Práci doporučuji k obhajobě.

Návrh hodnocení: B (velmi dobře)

V Olomouci, dne: 23. 5. 2022

podpis oponenta