

Posudek školitele diplomové práce Bc. Magdalény Nejedlé Molecular simulation of acid-base properties of short peptides and the A β (1-42) peptide

První část diplomové práce M. Nejedlé navazuje na bakalářskou práci, ve které studovala acidobazické chování krátkých peptidů. Oproti bakalářské práci je zde provedeno důkladné srovnání s publikovanými experimentálními výsledky i s výsledky simulací s atomistickým rozlišením. Po úspěšné obhajobě by měla na základě těchto výsledků vzniknout odborná publikace. S ohledem na značné množství získaných dat pro různé sekvence a kombinace parametrů, je v hlavním textu zahrnut pouze ilustrativní výběr výsledků. Další jsou pro úplnost uvedeny v dodatcích na konci práce.

Ve druhé části se M. Nejedlá věnuje studiu adsorpce delšího peptidu A β (1-42) na nabitý povrch. Tento projekt je motivován potenciálním využitím nabitých nanočástic pro inhibici agregace amyloidních peptidů. Je taky součástí mezinárodní spolupráce s prof. Ritou Dias a Dr. Pablem Blancem z univerzity v Trondheimu. Po metodické stránce se jedná o mnohem složitější simulaci než v první části práce. Roztok peptidu je zde simulován v blízkosti povrchu ve kvázi-2D periodickém uspořádání, a současně grand-kanonicky propojen s virtuálním rezervoárem soli o konstantní koncentraci. Cílem této části diplomové práce bylo především sestavení vhodného simulačního modelu a validace zvolených parametrů, případně získání předběžných výsledků týkajících se adsorpce peptidu na nabitý povrch. V projektu plánujeme pokračovat v rámci PhD studia M. Nejedlé.

Je vhodné zmínit, že Magda si v rámci práce musela rozšířit technické znalosti z programování, statistické termodynamiky i molekulových simulací nad rámec běžné náplně magisterského studia, a v některých případech (2D elektrostatika) dokonce i nad rámec běžné náplně specializovaných kurzů molekulových simulací. Jelikož navazovala na bakalářské studium medicínální chemie, potřebovala si doplnit taky znalosti matematiky a fyziky. Za tímto účelem absolvovala v magisterském studiu několik specializovaných kurzů.

U předložené práce bych rád vyzdvihl pečlivé a přehledné zpracování ilustrací a grafů, kterým autorka věnovala velkou pozornost a množství času. Na druhé straně, tento čas pak do jisté míry chyběl při psaní textu práce, který trpí různými nedostatky. Tyto nedostatky by bylo možné odstranit při finální revizi, která se ale nestihla před termínem odevzdání.

Dovolím si tvrdit, že M. Nejedlá získala vědecky zajímavé a originální výsledky. Odvedla značné množství práce nejen při získávání dat, ale taky při jejich zpracování a finální grafické prezentaci. **Navzdory některým výtkám k samotnému textu práce proto navrhuji hodnocení známkou výborně.**

V Praze, 6.6.2024



Doc. RNDr. Peter Košovan, PhD