

Posudek školitele bakalářské práce Vojtěcha Kepřty, Modelování acidobazických vlastností kopolypeptidů glutamátu a lysinu s tyrosinem

Ve své bakalářské práci V. Kepřta provedl simulace acidobazického chování dvou kopolypeptidů, jejichž vlastnosti současně studujeme experimentálně. Provedení a vyhodnocení titračních a fluorescenčních experimentů nebylo součástí této bakalářské práce. Nicméně, jedním z cílů této práce bylo srovnání s plánovanými experimenty, které byly prováděny souběžně, ale zpracované výsledky jsou k dispozici teprve nyní, po odevzdání práce.

V rámci bakalářské práce se V. Kepřta seznámil s metodikou molekulových simulací v constant-pH souboru, s používáním simulačního programu Espresso, a taky se spouštěním simulací ve výpočetních centrech. Díky tomu dokázal zcela samostatně získat, statisticky zpracovat a následně interpretovat svoje výsledky. Navíc se seznámil s vybranými partiemi teorie polymerů, zejména co se týče acidobazického chování polyelektrolytů. To mu umožnilo zasadit interpretaci aktuálních výsledků do kontextu známé teorie a předchozích simulací.

Výsledková část textu a některé části úvodních kapitol byly napsány až těsně před odevzdáním práce, takže jsem je jako školitel četl až po odevzdání. Dle mého názoru je celá práce je velmi dobře strukturovaná a obsahuje všechny formální náležitosti odborného textu. Je napsaná čtivě a srozumitelně a neobsahuje žádné významnější nepřesnosti či sporná tvrzení, s výjimkou drobných překlepů. Místy bych uvítal podrobnější rozbor některých výsledků, ale jinak oceňuji stručnost a to, že se autor dokázal zaměřit na podstatu výsledků, aniž by zabíhal do zbytečných detailů. Prokázal tím, že se velmi dobře orientuje ve studované problematice.

Po uzavření experimentální části studia výše zmiňovaných kopolypeptidů plánujeme, že výsledky prezentované v této práci se stanou součástí odborné publikace v kvalitním časopise. **S ohledem na výše uvedené proto navrhuji hodnocení práce známkou výborně.**

V Praze, 31.8.2024



Doc. RNDr. Peter Košovan, PhD