

Posudek oponenta bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Alena Kolaříková
Studijní program:	B2808 Chemie a technologie materiálů
Studijní obor:	Polymerní materiály a technologie
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Ústav inženýrství polymerů
Vedoucí bakalářské práce:	RNDr. Eva Kutálková, Ph.D.
Oponent bakalářské práce:	RNDr. Marek Ingr, Ph.D.
Akademický rok:	2018/2019

Název bakalářské práce:

Studium interakcí hyaluronan-hyaluronan metodou molekulové dynamiky

Hodnocení bakalářské práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání bakalářské práce	A - výborně
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	B - velmi dobře
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	A - výborně
4. Popis experimentů a metod řešení	A - výborně
5. Kvalita zpracování výsledků	B - velmi dobře
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	B - velmi dobře
7. Formulace závěrů práce	A - výborně

Předloženou práci **doporučuji** k obhajobě a navrhuji hodnocení

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Bakalářská práce se zabývá výzkumem vzájemných interakcí oligosacharidů hyaluronanu (HA) metodami molekulové dynamiky. Práce je přehledně sepsána, smysl simulací i jejich výsledky jsou zřejmé, vyvozené závěry z nich logicky vyplývají. Proto mám jen několik, spíše formálních, připomínek. Formální úroveň práce poněkud škodí nestandardní značení a hierarchizace kapitol práce. Odborné texty se zpravidla dělí na Úvod, Metody (a materiál, pokud jde o experimentální práci), Výsledky, Diskusi a Závěr, v těchto částech je pak možné vytvářet další podkapitoly. V této práci pak vzniká nejasnost např. v tom, která z kapitol patří ještě k metodické části a která už k výsledkům. Na některých místech je vidět až přehnanou snahu o jasné vysvětlení pozorování, která ovšem sklouzává k příliš hovorovému stylu vyjadřování, což v konečném důsledku působí spíše opačný efekt a vyvolává dojem spekulativnosti – jedná se o formulace typu „... opět není překvapením ...“, „A opět se nabízí otázka, ...“, „A s tím nejspíš souvisí i to, ...“, atp. Ve výsledkové sekci jsou některé obrázky nepříliš přehledné, zejména obrázky simulovaných molekul (obr. 15 a 19), kde je ke škodě snaha o zobrazení příliš velkých úseků řetězců v porovnání s oblastí zájmu. U grafů zobrazujících časovou závislost počtu vodíkových vazeb, např. obr. 13 a 14, by stálo za úvahu, zda nelze najít přehlednější zobrazení (např. bodový graf místo čárového), které by navíc umožnilo zobrazit všechny čtyři závislosti v jednom grafu – ve stávající verzi není příliš logické společné zobrazení dvou křivek pro okrajové hodnoty koncentrací v jednom grafu a pro hodnoty mezi nimi ve druhém. K interpretaci výsledků bych poznamenal, že není příliš jasné, na základě čeho byla posuzována relativní četnost vzájemných orientací monosacharidových jednotek při tvorbě vodíkových vazeb označovaných písmeny B, R, T. Závěrem bych však chtěl konstatovat, že i přes uvedené drobné nedostatky oceňuji jednak velké množství práce vykonané na samotném provádění a zpracování simulací, a především snahu získané výsledky jasně a smysluplně interpretovat. Proto práci doporučuji k obhajobě s hodnocením A – výborně.

Otázky oponenta bakalářské práce:

1. V práci je uvedeno, že četnost vzájemných orientací monosacharidových jednotek závisí na velikosti interakční energie mezi molekulami HA a sodnými ionty. Z uvedených grafů však tyto závěry nejsou jednoznačně patrné, navíc se zdá, že toto posouzení bylo prováděno jen pro velmi krátké úseky simulací. Navíc např. v grafu na obr. 16 se vůbec nevyskytuje typ B, popsány jsou jen typy R a T. Odkud tedy vyvozujete závěry týkající se četnosti jednotlivých variant (např. v 2. odstavci na str. 26)?
2. Z výsledků práce vyplývá především ten závěr, že za nízké koncentrace solí řetězce HA prakticky neinteragují. Je možné najít v literatuře experimentální výsledky, které by tuto skutečnost podporovaly?

Ve Zlíně dne **30. 05. 2019**

Podpis oponenta bakalářské práce