

Posudek oponenta diplomové práce

Příjmení a jméno studenta:	Bc. Alena Kolaříková
Studijní program:	N0722A130001 Inženýrství polymerů
Studijní obor:	Inženýrství polymerů
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	Inženýrství polymerů
Vedoucí diplomové práce:	RNDr. Eva Kutálková, Ph.D.
Oponent diplomové práce:	Prof. Ing. Pavel Mokrejš, Ph.D.
Akademický rok:	2020/2021

Název diplomové práce:

Molekulová dynamika dvou řetězců hyaluronanu ve směsných rozpouštědlech (virtuální experiment)

Hodnocení diplomové práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

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

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

A - výborně

Komentáře k diplomové práci:

Diplomová práce tematicky navazuje na bakalářskou práci studentky. Hlavním cílem práce bylo studium interakce mezi 2 řetězci hyaluronanu ve vodě a v dalších rozpouštědlech (dioxanu a terc-butanolu) s vodou. Práce reaguje tak na současný stav poznání, kdy struktury hyaluronanu v pevném stavu jsou dobře prostudované, ale u roztoků hyaluronanu tomu tak není.

V teoretické části jsou popsány vlastnosti, struktura a využití hyaluronanů (např. v kosmetice, medicíně a rovněž fyziologické funkce HA v organismu). Dále jsou uvedeny výhody molekulové dynamiky (např. předpověď interakcí ve studovaných systémech), ale rovněž její nevýhody. Velmi dobře je uveden princip simulací molekulové dynamiky.

V metodách diplomové práce jsou popsány parametry studovaného simulovaného systému, např. počet disacharidových jednotek každého řetězce hyaluronanu, typ rozpouštědla, koncentrace NaCl a přídavek organických molekul (terc-butanol a dioxan). Mezi kvantifikované charakteristiky patřily intermolekulární H-můstky ve studovaných systémech a mezi jakými atomy vznikají; dále se zkoumala distribuce molekul rozpouštědla v okolí řetězců.

Výsledky prokázaly, že na interakce mezi řetězci má vliv použité rozpouštědlo, přítomnost solí a vzájemné uspořádání řetězců. Při studiu molekul rozpouštědla v okolí řetězců bylo zjištěno, že v jejich okolí převažuje voda nad organickou složkou. Dále bylo potvrzeno, že počet H-můstek nesouvisí s počtem iontů v okolí řetězce. Ze studovaných rozpouštědel jsou řetězce hyaluronanu nejvíce ohebnější v přítomnosti dioxanu. Výsledky studie potvrdily zjištění jiných autorů, že struktura –COOH skupiny je orientována dovnitř šroubovice.

Klíčové zjištění diplomové práce při studiu interakce hyaluronanů je fakt, že typ použitého rozpouštědla výrazně ovlivňuje jejich interakce. Diplomantka rovněž navrhuje další směřování výzkumu pro simulaci chování řetězců hyaluronanu.

Cíle diplomové práce byly splněny.

Otázky oponenta diplomové práce:

1. Podílejí se na stabilisaci hyaluronanu v roztoku rovněž hydrofobní vazby?
2. Pokuste se srovnat vlastnosti hyaluronanu pro kosmetické aplikace s dalšími biopolymery využívanými pro tyto účely (zejména kolagenem a elastinem).
3. Jaký byl důvod provádět simulaci chování dvou řetězců hyaluronanu při pokojové teplotě?
4. Lze nějak vysvětlit, proč docházelo v průběhu simulace k přetáčení paralelních řetězců?
5. Pokuste se shrnout význam Vašich zjištění pro využití v praxi.

Ve Zlíně dne **17. 05. 2021**

Podpis oponenta diplomové práce