

## Posudek vedoucího diplomové práce

**Příjmení a jméno studenta:** Bc. Kolaříková Alena  
**Studijní program:** N0722A130001 Inženýrství polymerů  
**Studijní obor:** Inženýrství polymerů  
**Zaměření**  
(pokud se obor dále dělí):  
**Ústav:** Inženýrství polymerů  
**Vedoucí diplomové práce:** RNDr. Kutálková Eva, 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. Aktuálnost použité literatury                    | A - výborně        |
| 2. Využití poznatků z literatury                    | A - výborně        |
| 3. Zpracování teoretické části                      | 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        |
| 8. Přístup studenta k diplomové práci               | A - výborně        |

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

**A - výborně**

**Komentáře k diplomové práci:**

Předložená diplomová práce se zabývá simulacemi dvou řetězců hyaluronanu o dvaceti monosacharidových jednotkách ve dvou různých směsných rozpouštědlech voda/1,4-dioxan a voda/terc-butanol pomocí softwaru pro molekulovou dynamiku NAMD. Za pokojové teploty a normálního tlaku byly studovány interakce řetězců ve dvou různých vzájemných orientacích (paralelní, antiparalelní) za dvou různých koncentrací chloridu sodného (systém pouze neutralizován sodnými ionty; 0,2 M). Diplomantka navázala na bakalářskou práci, ve které se věnovala interakci dvou antiparalelně orientovaných řetězců hyaluronanu o čtyřiceti osmi monosacharidových jednotkách, fixovaných v těsné blízkosti, ve vodě se čtyřmi různými koncentracemi chloridu sodného za teploty 275 K a normálního tlaku.

Bc. Alena Kolaříková na zadaném úkolu pracovala po celou dobu se zaujetím, iniciativně a svědomitě. Při přípravě a následném studiu mnoha různých systémů odvedla obrovské množství práce. Jelikož v mnoha případech měly řetězce tendenci se spontánně vzdalovat, bylo potřeba, někdy i opakovaně, do simulací zasahovat a řetězce ručně přiblížit, resp. natočit do požadované vzájemné polohy. Následně bylo nutné navrhnout vhodné charakteristiky pro popis míry intermolekulární interakce a zkoumání vlivu druhu rozpouštědla a aktivní účasti iontů. Intenzivní a pečlivá práce vygenerovala několik pěkných zjištění a celou řadu pozoruhodných hypotéz, které by si zasloužily další zkoumání. Četné a různorodé výsledky přehledně sepsat byla další výzva, které se autorka zhostila se ctí. Zejména oceňuji samostatnost, zaujetí tématem, schopnost navrhovat směr dalšího postupu, aktivní snaha interpretovat dílčí výsledky a na základě mnoha jednotlivostí si udělat obrázek o celku.

Předložená diplomová práce prošla systémem Theses pro kontrolu plagiátorství. Systém našel podobnost pouze v příloze PI, kde je ukázkový vstupní konfigurační soubor, ve kterém se nastavují parametry simulací. Jeho podobnost s dalšími čtyřmi pracemi, které se také opírají o simulace, je tedy pochopitelná. U všech ostatních částí práce žádná shoda nalezena nebyla, práce tedy není plagiátem.

**Otázky vedoucího diplomové práce:**

bez otázek

Ve Zlíně dne **24. 05. 2021**

Podpis vedoucího diplomové práce