

## Posudek oponenta na diplomovou práci

**Autor práce:** Bc. Michal Ďurech

**Název práce:** *In silico* predikce vazebných vlastností lektinu RS20L

**Oponent a jeho pracoviště:** Mgr. Stanislav Kozmon, PhD., CEITEC MU

| Poř. číslo  | Kritérium hodnocení                                                                                                                                       | Body (0-3) |
|-------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| 1           | celkový rozsah diplomové práce (doporučení pro teoretickou část do 1/3 celkového rozsahu), vyváženost rozsahů jednotlivých částí a jejich strukturovanost | 2          |
| 2           | kvalita literární rešerše (množství použitých původních pramenných zdrojů, vhodnost výběru)                                                               | 3          |
| 3           | výstižnost formulace základního problému a cílů podle zadání práce a poznatků z literární rešerše                                                         | 3          |
| 4           | logika postupu při vlastní výzkumné práci                                                                                                                 | 3          |
| 5           | úplnost popisu používaných metodik                                                                                                                        | 2          |
| 6           | experimentální náročnost práce                                                                                                                            | 2          |
| 7           | úroveň zpracování experimentálních dat                                                                                                                    | 3          |
| 8           | úroveň diskuse – interpretace výsledků, zařazení do kontextu v literatuře.                                                                                | 2          |
| 9           | úroveň souhrnu (i v angličtině)                                                                                                                           | 3          |
| 10          | grafická úprava textu a obrázků                                                                                                                           | 3          |
| 11          | jazyková a stylistická úroveň, respektování platného názvosloví                                                                                           | 2          |
| 12          | správnost a úplnost legend u obrázků a tabulek (srozumitelnost bez zřetele k ostatnímu textu, vysvětlení značek, jednotky uváděných veličin)              | 3          |
| 13          | správnost používání citačních odkazů (přítomnost necitovaných údajů, dodržování jednotného stylu citací, používání oficiálních zkratk časopisů)           | 3          |
| Celkem bodů |                                                                                                                                                           | 35         |
| Známka      |                                                                                                                                                           | A          |

max 39

### Konkrétní připomínky a dotazy (možno připojit samostatný list)

Formálne pripomienky:

- v celom texte je nesprávne uvedené methyl- podľa platného slovenského názvoslovía je správne metyl-
- L- a D- označenie sacharidov sa má správne formátovať v texte ako „small caps“
- v tabuľkách a v niektorých popisoch obrázkov by mali byť konfigurácie na anomérnom uhlíku,  $\alpha$ - a  $\beta$ -, tiež naformátované ako symboly

Dotazy:

1. V MD simuláciách používate kombináciu ff99 a GLYCAM06 silových polí. Ako ste ošetrili ich nekompatibilitu a tiež by ma zaujímalo či ste použili naozaj ff0é alebo ff99sb.
2. Za akých podmienok bežali MD simulácie?
3. Píšete, že počas dokovania boli počet behov a veľkosť populácie nastavené podľa počtu torzných uhlov. Je na to nejaký špecifický vzťah podľa ktorého sa to dá vypočítať?

**Chyby, které je nutno opravit**

**Závěr: práci doporučuji k obhajobě.**

V Brně dne 27.5.2011

.....

podpis