

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- | | |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input type="checkbox"/> bakalářské práce | <input type="checkbox"/> diplomové práce |

Autor/ka: **Bc. Jana Hrudíková**

Název práce: **Ramanova optická aktivita a konformační flexibilita peptidů v roztoku**

Studijní program a obor: **fyzika, biofyzika a chemická fyzika**

Rok odevzdání: **2009**

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: **Doc. RNDr. Vladimír Baumruk, DrSc.**

Pracoviště: **Fyzikální ústav UK**

Kontaktní e-mail: **baumruk@karlov.mff.cuni.cz**

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Pomocí Ramanovy optické aktivity (ROA) lze získat cenné informace o prostorové struktuře studovaných molekul. Přirozeným objektem studia pro Ramanovu optickou aktivitu jsou téměř všechny flexibilní, biologicky významné molekuly. Širší aplikaci ROA dosud brání nejen značná experimentální náročnost ale také složitý teoretický aparát potřebný k interpretaci spekter. Proto cílem diplomové práce Jany Hrudíkové bylo proměřit ROA spektra vybraného souboru jednoduchých peptidů a případně i dalších modelových látek a ve spolupráci s Doc. P. Bouřem z Ústavu organické chemie a biochemie AV ČR rozvíjet výpočetní postupy pro komplexní interpretaci ROA spekter aminokyselin a jednoduchých peptidů při zahrnutí realistických modelů rozpouštědla i flexibility studovaných molekul. Diplomová práce souvisí s řešením projektu GAČR 202/07/0732 "Konformační flexibilita peptidů v roztoku".

Jako vedoucí mohu konstatovat, že diplomantka stanovené náročné úkoly zvládla a splnila. Během jejich řešení projevila píli a prokázala značnou invenci, zručnost i mimořádnou pečlivost jak při výpočtech, tak při experimentech. Diplomová práce je sepsána přehledně a čtivě, s minimem chyb či formulačních nepřesností a na velmi dobré grafické úrovni. Nadprůměrný rozsah práce (125 stran) i bohatý seznam literárních odkazů (76 citovaných prací) je odrazem mimořádného úsilí diplomantky, jejího pracovního nasazení, širší řešených problémů a bohatosti dosažených výsledků. Krom nezbytného úvodu a závěru je práce rozčleněna do pěti kapitol. První kapitola věnována struktuře peptidů z pohledu ROA spektroskopie, druhá kapitola pak výpočtům ROA spekter *ab initio* metodami včetně přístupů k porovnávání naměřených a vypočtených spekter. Ve třetí až páté kapitole jsou prezentovány a diskutovány výsledky diplomové práce týkající se histidinu (kapitola 3), cyklického hexapeptidu c(Phe-D-Pro-Gly-Arg-Gly-Asp) představujícího model pro studium β -otoček a antiparalelního β -skládaného listu (kapitola 4) a modelového fragmentu Phe-D-Pro, jehož příspěvek je v Ramanově spektru hexapeptidu dominantní (kapitola 5). Náplň diplomové práce byla v průběhu řešení upřesňována. Kvůli značným problémům s měřením na histidinovými vzorcích (vysoké fluorescenční pozadí a nedostatečná stabilita některých vzorků, která je nutnou podmínkou pro časově náročné ROA experimenty) se naše pozornost a důraz přesunula na simulaci a interpretaci Ramanových a ROA spekter cyklického hexapeptidu a posléze i jeho fragmentu.

Některé dílčí výsledky diplomové práce diplomantka prezentovala formou posteru na 1st International Conference on Vibrational Optical Activity v Manchesteru v srpnu 2008.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze dne 24. srpna 2009

