

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího
 bakalářské práce
- posudek oponenta
 diplomové práce

Autor: *Martin Golan*

Název práce: *Studium reakčního mechanismu interakce báží nukleových kyselin s dirhodiiovými komplexy aktivními v protirakovinné léčbě metodami kvantové chemie*

Studijní program a obor: Fyzika, obecná fyzika

Rok odevzdání: 2010

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Zuzana Vokáčová, Ph.D.

Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i

Kontaktní e-mail: zuzana.vokacova@uochb.cas.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:

Předložená bakalářská práce Martina Golana „*Studium reakčního mechanismu interakce bázi nukleových kyselin s dirhodiiovými komplexy aktivními v protirakovinné léčbě metodami kvantové chemie*“ je výpočetní studie zaměřená na vlastnosti interakce dirhodiiového komplexu s guaninem. Tento komplex byl ve studii uvažován ve třech různých variantách – za prvé jako neutrální, a poté protonovaný ve dvou různých polohách. Práce si klade za cíl přispět k osvětlení problematiky nalezení nových protirakovinových léčiv, jež by mohly v budoucnu nahradit dosud používanou cisplatinu.

Po formální stránce je práce dobře vyvážená. Autor nejdříve krátce popisuje problematiku organokovových komplexů, dále pak v následujících dvou kapitolách stručně shrnuje teoretické základy všech metod a přístupů, které byly ve vlastní práci použity. Samotné výsledky jsou shrnuty v poslední kapitole, kde jsou přehledně prezentovány formou tabulek a obrázků. Studovaná problematika je tím pádem zpracovávána systematicky. Seznam použité literatury poukazuje na autorovo dostatečné seznámení se se studovanou problematikou. Práce je doplněna o obsáhlou část příloh, kde především oceňuji výborné grafické zpracování obrázků.

Výpočetní metody použité v této práci jsou adekvátní k popisu studovaného systému, stejně jako zvolené báze. Počáteční geometrie byly převzaty z diplomové práce, která byla na pracovišti řešena v minulých letech. Práce Martina Golana tedy navazuje na dlouhodobý program výzkumu na KCHFO. Po neoptimalizování geometrií v solvatačním modelu PCM, autor provedl výpočetní analýzu těchto struktur a odečetl potřebné geometrické parametry, spočetl hodnoty parciálních nábojů, a určil potřebné termodynamické veličiny. Autor svůj postup vysvětluje dostatečně, a popis výpočetního protokolu umožňuje jeho reprodukování.

Martin Golan svou předkládanou práci prokazuje, že si dostatečně osvojil základy kvantově-chemických metod a pomocí nich splnil vytyčené cíle. Jeho výsledky přinášejí nové poznatky v oblasti organokovové chemie a přispívají k vědeckému programu celého kolektivu. Práce zcela splňuje požadavky na bakalářskou práci, a proto ji doporučuji k obhajobě s hodnocením výborně.

Spíše pro potřeby autora uvádím následující připomínky:

- Práce obsahuje kvalitní výsledky. Jejich prezentaci by však výrazně prospěly informačně obsáhlejší popisky obrázků. Tabulky, přestože jsou zpracovány přehledně, postrádají popisek úplně.
- Tabulky 1, 3, 5, 7, 9 a 11 mají řádky, které neobsahují žádný číselný údaj. Z textu a obrázků je sice zřejmé, že dané údaje nemají u jednotlivých případů smysl. Zařazení těchto řádků v tabulce je z tohoto důvodu ale nadbytečné.
- Odkaz na standardní číslování uvedený pod čarou na straně 6 chybně ukazuje na stranu 20. Patrně byla míněna strana 19.
- Práce obsahuje někde poněkud nesprávné české formulace, které vznikly pravděpodobně nevhodným překladem z angličtiny. Na jednu stranu je sice dobré, že je autor schopen využívat i zahraniční literaturu, na stranu druhou by se měl těmito stylistickými chybičkám, které vznikají většinou z nepozornosti, snažit v budoucích pracích vyhnout. Cituji příklady ze strany 21 „... (vazba) má větší délku“, „...vazba vody v axiální poloze je velmi slabá a citlivá“ (citlivá na co?), „relativně velkou vzdálenost vazby“.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

K práci mám tyto dotazy:

Autor ve své práci zmiňuje, že použití solvatačního modelu při optimalizaci geometrie bude pravděpodobně poskytovat výsledky bližší skutečnosti živé buňky než je tomu u struktur optimalizovaných v plynné fázi. Mohl by autor krátce okomentovat jakých rozdílů ve výsledcích dosáhl ve své práci (kde používat solvatační model) v porovnáním s výsledky práce, z níž autor vychází a v které byla optimalizace prováděna v plynné fázi?

Autor několikrát v textu popisuje vazbu její silou. Např. na straně 28 je uvedeno: „Během reakce se zkrátí a zpevní vazba C6-O6, naopak se prodlouží a oslabí Rh'-O'“. Co je přesně míněno oslabováním a zpevněním vazby? Na základě jakých vypočtených parametrů byla síla vazby uvažována?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 10.6.2010, RNDr. Zuzana Vokáčová, Ph.D.

