

## Posudek disertační práce Mgr. Josefa KAPITÁNA

Předložená disertační práce Mgr. Josefa Kaptána, nazvaná „Teoretický a experimentální rozvoj Ramanovy optické aktivity jako metody studia biomolekul ve vodném prostředí“ je zhruba stostránkovým původním textem autora, který je proložen celkem pěti přílohami, publikačními výstupy v různém stadiu zpracování (od práce již publikované přes práce přijaté redakcemi až po jednu připravenou k odeslání). Publikační výstupy tak nejsou tradiční přílohou předkládané práce, ale její nedílnou součástí. Práce představuje souhrnnou vědeckou studii, zahrnující jak náročnou experimentální práci v oblasti vývoje měřicí aparatury a měření spekter Ramanovy optické aktivity (ROA) a Ramanových spekter biomolekul, tak teoretickou práci v oblasti simulace spekter nedílně spojenou s vývojem postupů pro zpracování a vyhodnocování dat. Veškeré dosažené výsledky jsou pak evidentně podloženy hlubšími znalostmi stavu problematiky, a to opět vyváženě jak v oblasti experimentální, tak výpočetní.

Po všeobecněji formulovaném úvodu následuje velmi užitečná část, jasně, přiměřeně stručně a konkrétně formulující cíle práce. Velmi užitečná je následující kapitola věnovaná Ramanově optické aktivitě z pohledu experimentálních přístupů a dosud pomocí ROA studovaným molekulárním systémům. Informačně bohatý text s řadou odkazů na publikované studie vhodně doplněný schémata a obrázky svědčí o autorově výborné orientaci v dané problematice. Neméně obsahově přínosná je třetí kapitola věnovaná simulacím spekter, resp. teorii ROA. Čtvrtá kapitola je již věnována výsledkům práce autora, a to v oblasti budování ROA spektrometru a jeho optimalizačních úpravách ROA, ladění spektrometru před experimentem, nutného software pro řízení experimentu a zpracování zaznamenávaných dat, metodologii přípravy vzorku pro minimalizaci rizika výskytu spektrálních artefaktů a rizika poškození či zničení vzorku během náročného experimentu. Je patrné, že velká pečlivost byla věnována získání relevantních spektrálních dat s minimalizací řady rušivých vlivů, ať již optimalizací postupů záznamu dat, tak i jejich následného matematického zpracování. Pátá kapitola je pak věnována naměřeným a simulovaným spektrům logicky na sebe navazující série biomolekul. Zde je průvodní text autora poměrně stručný, někde jde spíše o části textů příložených publikací převedených do českého jazyka. Nicméně, vložené texty publikačních výstupů obsahují veškeré relevantní informace. Na publikacích uvedených v kapitole 5.4 věnované „hinge“ peptidu a jeho analogů je patrné, jak osídlná je vědecko-výzkumná práce, kdy další dosažené výsledky zpochybní předchozí zdánlivě bezproblémovou interpretaci některých spektrálních rysů a nutně vedou k hlubšímu zamyšlení nad interpretací dat a nutnosti používání kritického myšlení jak ve vztahu k vlastním, tak k publikovaným výsledkům. Závěr práce shrnuje veškeré dosažené výsledky, jež odpovídají v úvodu formulovaným cílům, a tak celé dílo bezkonfliktně uzavírá.

K odborné úrovni původního textu stejně jako příložených publikací nemám významnějších připomínek pouze níže si dovoluji uvést několik dotazů. K práci mám nejprve několik ryze formálních připomínek. V úvodu práce je uveden seznam zkratek, který je však evidentně neúplný (např. zkratky CIS, CIS, COM, DOG, HF, KS, NNZ, TTL v něm chybějí). Počet překlepů či typografických chyb je docela malý. Na straně 15 nevidím důvod k uvádění velkých písmen na začátku jmen některých používaných látek (obzvláště, když u jiných látek tento styl použit není), na str. 16 má být „cysteinu“ (místo chybného „systeinu“), na téže stránce není správně použit termín „amidovou“, na str. 17 chybí mezera mezi slovy „peptidového řetězce“, na str. 21 chybí vhodná předložka za slovem „citlivá“, na str. 26 chybí mezera mezi tečkou za větou a slovem „Zde“. Na str. 35 je v rovnici 3.47 uvedena proměnná  $E_{KS}$ , označená v předcházející části věty jako celková energie, níže pak je použit termín „KS energie“ kde trochu formálně postrádám uvedení vazby tohoto pojmu na  $E_{KS}$ , příp. na výše uvedená jména Kohn a Sham. Na str. 40 je ve větě začínající slovem „Prakticky“ uvedeno dvojmo sloveso „je“. Na str. 41 je pak zdvojení slov „času čase“, má být pouze „času“. Na str.

42 má být „Tato“ místo uváděného „Tuto“. Na str. 43 dole (začátek posledního odstavce) chybí oddělení vložené vztahné věty čárkami. Na str. 49 stejně jako na str. 51 jsou objemy vzorku uváděny v  $\mu\text{m}$  místo správného  $\mu\text{l}$ . Na str. 52 je v předposledním odstavci navíc slůvko „a“ před slovem „napojen“. Na str. 78 je zřejmě chybně odkazováno na obr. 4.17, když správný odkaz má být na obr. 4.18. Na str. 82 chybí vysvětlení zkratky TFE v textu (je pouze v seznamu zkratek v úvodu práce). Na str. 84 chybí čárka před slůvkem „tak“. V příloze 1 na str. 4 chybí tečka za větou (na konci odstavce před podkapitolou „Method“). V téže příloze by si tabulka I zasloužila pečlivější zarovnání sloupců. V téže příloze 1 u souhrnu popisů obrázků je navíc tečka (zdvojená tečka) za poslední větou uvedenou pro „Figure 5“. Na str. 5 přílohy 2 nerozumím termínu „pseudoration coordinates“ – prosím autora buď o ujištění o tom, že se jedná o překlep, nebo o vysvětlení pojmu. Na str. 8 téže přílohy chybí mezera mezi číslem 1600 a jednotkou  $\text{cm}^{-1}$ . U popisu „Figure 5“ (str. 20 téže přílohy 2) chybí velké písmeno na začátku popisu a zcela jistě překlepem je v popisu uvedené slovo „Boltzpan“. U popisu „Figure 7“ (str. 22 téže přílohy) má být uvedeno  $\text{CO}_2$  (tj. číslo dvě v dolním indexu). Na str. 92 je poněkud nešťastné sousloví „s výjimkou kromě“.

Nyní bych si dovolil přistoupit k mým, výše avizovaným dotazům.

1/ Autor na více místech používá termín „rozsah fundamentálních vlnočtů“. V závěru práce ho i specifikuje číslly ( $100 - 2300 \text{ cm}^{-1}$ ). Prosím pěkně autora o vysvětlení, co přesně uvedeným termínem míní a proč ho pak vztahuje k uvedenému spektrálnímu intervalu.

2/ Na str. 93 vlastního textu, resp. v příloze 3 (str. 10) autor uvádí odlišné polohy pásu přiřazeného vibraci amid I pro Ramanova spektra měřená ve vodě a v trifluoroethanolu. V téže spektrální oblasti jsou patrné (z „Figure 3“ přílohy 3) i odlišnosti v korespondujících ROA spektrech, jejichž diskusi jsem v textu práce ani přílohy nenašel. Prosím pěkně, mohl by autor alespoň stručně diskutovat pravděpodobné příčiny pozorovaných efektů (změna polohy i intenzity) v uvedených ROA spektrech a porovnat informační výpověď ROA spekter s odpovídajícími Ramanovými spektry (všechna data jsou uvedena ve „Figure 3“ přílohy 3). Uvažuje autor o dalším studiu uvedené látky v jiných rozpouštědlech či o studiu uvedené látky pro další látky?

3/ Poslední můj dotaz (trojdotaz) se týká studie „hinge“ peptidu, kdy autor v závěru své práce uvádí: „Hinge peptid je také ideálním modelovým systémem pro studium disulfidové vazby, která doposud nebyla pomocí ROA zkoumána.“ Ptám se, je „hinge“ peptid skutečně tak ideálním modelovým systémem, jestliže se v jeho ROA spektrech nepodařilo spolehlivě identifikovat vibraci  $\nu(\text{S-S})$ . Dále se ptám, jaká je předpokládaná interpretace pásu  $523 \text{ cm}^{-1}$  pozorovaného jak v ROA spektru „hinge“ peptidu, tak jeho methioninového analogu („Met analogu“) (Figure 3 přílohy 5). A poslední částí mého trojdotazu je otázka na volbu vhodné další látky pro pokračující snahu o studium disulfidických můstků pomocí ROA spektroskopie.

Výše uvedené drobné formální připomínky nemají vliv na celkově vysokou kvalitu předkládané práce a dotazy nejsou vyvolány nedostatečnostmi v textu práce, naopak vycházejí z toho, že se jedná o práci průkopnickou, a tudíž evokující otázky o jejím pokračování.

**Celkově hodnotím předkládanou práci jak po stránce odborné, tak formální jako velmi zdařilou, splňující či spíše převyšující kritéria kladená na disertační práce a plně dokumentující kvalifikaci disertanta. Vřele doporučuji předloženou práci k obhajobě.**

V Praze dne 24. února 2006



VŠCHT Praha