

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

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

Autor/ka: Bc. David Zoul

Název práce: Charakterizace vibračních módů složek nukleových kyselin pomocí proton-deuteronové výměny

Studijní program a obor: fyzika, biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2010

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Ivana Šloufová, Ph.D.

Pracoviště: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie, PřF UK, Praha

Kontaktní e-mail: sloufovi@natur.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:

Předložená diplomová práce Davida Zoula je složena ze dvou hlavních částí. V první se diplomant zabýval návrhem termostatovaného otočného držáku 4 kyvet pro Ramanův spektrometr a jeho testováním z hlediska teplotních charakteristik. V druhé části práce diplomant použil toto nově sestavené zařízení k prvotním experimentům – studiu isotopové substituce vodíku deuteriem v molekule rozpouštědla (vody), basích nukleových kyselin (cytosinu a uracilu) a rovněž i nukleosidu (uridinu) pomocí Ramanovy spektroskopie.

Vytčené cíle diplomové práce diplomant splnil. Výsledky jeho práce, nový termostatovaný držák kyvet bude jistě velkým přínosem pro celé oddělení fyziky biomolekul. V tomto směru je jeho práce velmi ojedinělá, neboť nebývá pravidlem, že výsledkem diplomové práce v oboru Ramanovy spektroskopie je konkrétní nové zařízení.

V teoretické části práce je podrobně teorie Ramanova rozptylu jak z hlediska klasické, tak kvantové teorie, následuje část týkající se symetrie molekulových vibrací. Závěrečné 2 kapitoly teoretické části se zabývají poměrem signál/šum v Ramanových spektrech a metod zpracování naměřených spekter. Následuje kapitola týkající se použitých experimentálních metod a chemikálií. V další kapitole diplomant představil zkonstruovaný termostatovaný držák kyvet a uvádí pečlivě zpracovaná testovací měření a teplotní charakterizace držáku. Pátá kapitola je věnována vlastním měřením isotopických substitucí vody a studovaných molekul. Naměřená spektra byla interpretována pomocí výpočetních programů statistické metody faktorové analýzy. Pro kvalitnější zpracování naměřených dat bylo využito k úpravě pozadí spekter i metody ortogonálních diferencí do níž byla zahrnuta i spektra H_2O a D_2O .

K vlastnímu zpracování textu práce bych měla několik následujících připomínek:

- Úvodní teoretická část (její první 3 části) nepřiliš úzce souvisí s vlastní prací a naopak jsem postrádala přehled literatury, stávajících poznatků a úvodu do problematiky Ramanových spekter směsí H_2O – D_2O a isotopových substitucí v nukleových basích.
- Citace v textu diplomové práce nejsou řazeny vzestupně. Mezi citace je i 4x zařazen odkaz na strukturní vzorce molekul vody, cytosinu, uracilu a uridinu – čerpaných z internetové encyklopedie wikipedie, což jistě není nutné.
- Hůře se mi orientovalo v obrázcích zachycujících celkový spektrální vývoj, ve kterých není vůbec označena časová posloupnost spekter a ze samotného obrázku nevyplývá (např. obr. 31, str. 63).
- Rovněž i opatření spekter konkrétními polohami pásů (jejich hodnot použít i v textu), nebo alespoň zvýrazněním pásů sledovaných při isotopových výměnách by nebylo na škodu. Rovněž by nebyla na škodu obšírnější diskuze (včetně srovnání získaných dat s literaturou) u naměřených spektrálních závislostí.
- K jazykové úrovni práce - termíny „nabírání a sejmutí spekter“, jež se v práci opakovaně vyskytují, by bylo jistě možné nahradit vhodnějšími termíny. Termín „po určité době jsme do kyvety přidali“ by jistě bylo možné nahradit konkrétnějším časovým okamžikem. (str. 62, 1. odstavec, 2. řádek).

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- Jaký vibrační mód příslušející molekule H_2O je pozorovatelný v oblasti centrované kolem 2200 cm^{-1} ?
- str.69 – proč ze série spekter titrace vodního roztoku cytosinu těžkou vodou bylo po ortogonalizaci za použití obecného polynomu i 2 komponent spekter vody vyloučeno několik posledních spekter?
- Jak byl určen normovací koeficient 4 (poslední řádka textu na str. 71)?

Na závěr bych ráda poznamenala, že přes mnou uvedené více-méně formální nedostatky práce, plynoucí zejména z obtížné situace diplomanta při zpracovávání vysoce praktického tématu práce je její přínos nesporný a splňuje podmínky kladené na diplomovou práci. Proto ji doporučuji k obhajobě s hodnocením výborně.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze, 6.9.2010

RNDr. Ivana Šloufová, Ph.D.

