

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

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

Autor/ka: **Denisa Kubániová**

Název práce: **Studium vlivu příměsí na strukturní vlastnosti a stabilitu Langmuirových monovrstev mastných kyselin pomocí molekulových simulací**

Studijní program a obor: **Fyzika – Biofyzika a chemická fyzika**

Rok odevzdání: **2014**

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: **RNDr. Martina Roeselová, Ph.D.**

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

Kontaktní e-mail: **martina.roeselova@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:

Diplomová práce Denisy Kubániové je zaměřena na studium interakcí amfifilních molekul s aromatickým cyklem v hydrofobní části (kys. benzoová, fenylalanin) s Langmuirovou monovrstvou mastné kyseliny rozestřeno na povrchu vodné fáze. Konkrétní náplní práce bylo provedení MD simulací pro vybrané molekuly na povrchu roztoku a na rozhraní roztok – monovrstva a analýza výsledků se zaměřením na vliv aromatických příměsí na strukturní vlastnosti povrchového filmu.

Teoretická část práce (první dvě kapitoly) obsahuje stručný úvod do problematiky Langmuirových monovrstev a jejich počítačového modelování, vysvětlení cíle práce a popis systémů a metod, použitých v autorkou provedených simulacích a jejich analýze. Vlastní výsledky jsou uvedeny a diskutovány ve třetí kapitole, závěry pak shrnuty ve čtvrté kapitole.

Práce obsahuje zajímavé originální výsledky, a to nejen co se týče interakce zkoumaných aromatických molekul s povrchovým filmem a strukturní vlastnosti smíšeného filmu. K velmi důležitým výsledkům práce patří zjištěná tendence aromatických amfifilních molekul k tvorbě agregátů, a to jak na volném povrchu roztoku, tak na rozhraní roztok – monovrstva či uvnitř monovrstvy. Další výzkum tímto směrem, především zkoumání procesu vzniku větších agregátů fenylalaninu a jejich struktury, by mohl přinést porozumění specifického chování fenylalaninu v buňkách při fenylketonurii.

Po obsahové stránce diplomová práce poněkud utrpěla dlouhodobým zahraničním pobytem diplomantky v závěrečném semestru magisterského studia v rámci programu Erasmus, během kterého byla velmi vytížená studijními povinnostmi na zahraniční univerzitě a měla jen velmi omezenou možnost se diplomové práci věnovat. Z nedostatku času tak byly některé simulace kratší, než by bylo žádoucí, a v analýze nebylo možné jít dostatečně do hloubky – v některých případech tak analýza zůstala spíše jen na kvalitativní úrovni. Z tohoto důvodu navrhuji hodnocení práce stupněm velmi dobře.

Denisu Kubániovou celkově hodnotím jako kvalitní studentku. Vyzdvihnout bych chtěla především její obrovskou pracovitost a vytrvalost. Díky nim se Denise podařilo i přes výše zmíněné překážky získat významné výsledky, které velmi napomohou interpretaci experimentů prováděných ve spolupracující laboratoři na University of Colorado, Boulder.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) Jaká je časová škála, na níž dochází k „přeorientování“ molekul palmitové kyseliny za přítomnosti fenylalaninu uvnitř monovrstvy (obr. 3.15)?
- 2) Jaké změny v uspořádání klastrů uvnitř monovrstvy lze očekávat pro zwitterionovou formu fenylalaninu v porovnání s chováním neutrálního fenylalaninu?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 27. 8. 2014

RNDr. Martina Roeselová, Ph.D.