

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autorka: Petra Matunová

Název práce: Studium termodynamických a kinetických parametrů interakcí oligomerních modelů DNK s organokovovými komplexy aktivními v protirakovinné léčbě stanovených metodami kvantové chemie a kombinovanými QM/MM metodami
Studijní program a obor: Fyzika, Biofyzika a chemická fyzika
Rok odevzdání: 2015

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Zuzana Sochorová Vokáčová, Ph.D.
Kontaktní e-mail: zuzana.sochorova@centrum.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 oponenta:

Předložená diplomová práce Petry Matunové „*Studium termodynamických a kinetických parametrů interakcí oligomerních modelů DNK s organokovovými komplexy aktivními v protirakovinné léčbě stanovených metodami kvantové chemie a kombinovanými QM/MM metodami*“ je výpočetní studií zaměřenou na popis interakcí modelů nukleových kyselin a organokovových komplexů. Studentka dělí výpočetní část práce na další dvě části. V první popisuje reakční parametry čtyř platinových komplexů s guaninem a v druhé části se zabývá komplexem ruthenia - nejprve taktéž jeho reakcí s guaninem, následně pak jeho reakcí s větším modelem DNA.

Práce byla koncipována následujícím způsobem. Autorka se v úvodu krátce věnuje problematice organokovových komplexů a jejich reakcí. V následujících dvou kapitolách autorka shrnuje teoretické základy všech metod a přístupů, které zde byly použity. Všechny získané výsledky jsou shrnuty v posledních kapitolách, kde jsou kromě jiného prezentovány formou přehledných tabulek a obrázků. Na konci autorka uvádí seznam použité literatury.

Množstvím výsledků se předložená práce jeví jako obsáhlá, po obsahové stránce však v práci shledávám několik nedostatků. Hned na začátku postrádám jakýkoliv stanovený cíl; čtenář tedy neví proč a za jakým účelem byla práce prováděna. Dále, popis výpočtu uvedený v kapitole „Methods“ nepovažuji za příliš návodný. V diplomové práci bych očekávala popis, který by umožňoval reprodukci získaných dat. Navíc není například úplně jasné, jakým způsobem studentka získala studované modely. Přejdu-li k výsledkům, tak zde postrádám aspoň nějaké srovnání s experimentem. Na nutnost srovnávat teoretické výsledky s experimentálními sama autorka upozorňuje v úvodu, přesto tak sama ve své diplomové práci nečiní. Posledním a nejpodstatnějším nedostatkem práce však shledávám, že postrádá závěr. V kapitole „Conclusion“ sice studentka stručným a jasným způsobem popisuje dosažené hodnoty z výpočtů, co však výsledky na poli vědy znamenají a co z nich plyne, zde uvedeno není. Všechno zmiňované souvisí s prezentací vědecké práce a ta tvoří neoddělitelnou složku vědeckého bádání. Diplomovou práci je proto nutno hodnotit i s ohledem na výše uvedené.

Pokud jde o jazykovou podobu práce, tak velice oceňuji, že se studentka snažila práci napsat v angličtině. Toto úsilí však nedopadlo úplně nejlépe. Některé anglické věty jakoby byly pouhým přepisem z češtiny do angličtiny a neodpovídají svou úrovní odbornému anglického textu očekávanému od diplomové práce. Někdy dokonce česká skladba věty tu anglickou úplně popírá. Studentka si v průběhu následujících let svoji vědeckou angličtinu určitě zlepší. Pro tuto práci by ale bylo lepší, kdyby studentka napsala text v češtině.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Jak už jsem uvedla výše, autorka zcela v práci opomenula zmínit vytyčené cíle a ze získaných výsledků utvořit patřičné závěry. Přestože je každému jasné, že jakákoliv studie na poli protirakovinových léčiv je velice užitečná, jistě by bylo na místě vysvětlení, proč to všechno bylo studováno a co zrovna tato práce potencionálně řeší. Prosím proto studentku, aby stručně okomentovala, co z vědecké stránky od své práce očekávala a zda toho dosáhla.

Dále bych ráda, aby studentka dala své výsledky do srovnání s experimentem.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: