

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autorka: Bc. Jana Hrudíková

Název práce: Ramanova optická aktivita a konformační flexibilita peptidů v roztoku

Studijní program a obor: fyzika, biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2009

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Josef Kapitán, Ph. D.

Pracoviště: University of Glasgow, Department of Chemistry, G12 8QQ, Glasgow, UK

Kontaktní e-mail: kapitana@chem.gla.ac.uk

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 Bc. Jany Hrudíkové se zabývá experimentálními i teoretickými aspekty využití Ramanovy optické aktivity ke studiu konformační flexibility peptidů v roztoku. Po stručném úvodu, a přehledně formulované náplni práce následuje v kapitole 1 charakteristika struktury peptidů, popis použité experimentální techniky a zpracování spekter a v kapitole 2 podrobný přehled komplexních postupů používaných při simulaci spekter. V následujících kapitolách 3–5 jsou uvedeny původní výsledky autorky, každá kapitola by podle mého názoru mohla být tématem samostatné diplomové práce. Nejprve jsou uvedeny experimentální výsledky týkající se histidinu, jeho protonačních forem, dipeptidů a komplexů s mědí, na nichž autorka dokazuje, že velmi dobře zvládla experimentální techniku a měření velmi obtížných vzorků. V následující kapitole jsou popsány simulace spekter cyklického hexapeptidu. Z výpočetního hlediska jde o velkou molekulu, jejíž studium je navíc komplikováno velkým počtem různých konformací, nezanedbatelnou interakcí s rozpouštědlem a simulace spekter je tak na samé hranici současných možností. Autorka velmi úspěšně využívá celou řadu technik, jak *ab initio* metody, tak i molekulární dynamiku a další pokročilé výpočetní algoritmy vyvinuté skupinou Dr. Bouře, přičemž zároveň zdařile popisuje úskalí a omezení, které při výpočtech nastávají. Autorce se podařilo ve spektru cyklopeptidu identifikovat dominantní příspěvek fragmentu Phe-D-Pro, jehož studiu je věnována poslední kapitola. Zmiňované původní výsledky jsou také výborným východiskem k dalšímu výzkumu, kterému se podle vlastních slov hodlá autorka věnovat během řešení dizertační práce.

Práce obsahuje vzhledem k velmi nadstandardnímu rozsahu malé množství formálních nedostatků: nekonzistentní použití spodních indexů X_0 a R_0 v rovnících 2.49, nekonzistentní použití horních indexů R a L v obecném výrazu 2.50 pro výpočet Ramanovy a ROA intenzity, když použití horních indexů je rezervováno pro označení modulace budícího záření (viz. obr. 1.7). Na str. 49 je σ označeno jako „pološířka pásu“, čímž je patrně myšlena „šířka v polovině výšky pásu“, stejně tak i v dalším textu. Nejní jasný smysl a jednotky použité ve vzorci 2.55. Uvádění absolutní hodnoty vypočtené energie (str. 99 a dále) nemá fyzikální opodstatnění.

Celkově lze hodnotit práci jako velmi úspěšnou a podle mého názoru přesahující rozsah diplomové práce.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Prosím o vysvětlení vztahu 2.55 na str. 50 týkající je maxima intenzit vibračních pásů.
2. V kapitole 3 je popsáno měření histidinu v různých protonačních formách, přičemž pH bylo nastavováno přidáváním poměrně koncentrovaného hydroxidu. Může tento faktor způsobovat částečný rozpad vzorku při přípravě? Pokud ano, jak je možno se použití koncentrovaných hydroxidů vyhnout?
3. Je možno zhodnotit, který stupeň v komplexní simulaci ROA spekter je výpočetně (časově) nejnáročnější? V srpnu 2009 byla představena nová verze výpočetního programu Gaussian, ve které je implementována analytická derivace tenzorů optické aktivity, což výpočet urychluje cca 10-20x. Bude moci toto zefektivnění výpočtu hrát podstatnou roli např. při simulování spekter flexibilních molekul?

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: Glasgow, 3. září 2009

