

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autorka: Bc. Markéta Kubáňová

Název práce: Využití Ramanovy optické aktivity při studiu konformace strukturně významných skupin v peptidech a proteinech

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:

Předložená diplomová práce Bc. Markéty Kubáňové je experimentální prací zaměřenou na aplikaci Ramanovy optické aktivity (ROA) ke studiu konformací významných strukturních motivů peptidů a proteinů. V teoretickém úvodu jsou stručně popsány základy teorie ROA a je zpracována rešerše týkající výzkumu struktury a konformací aminokyselin, peptidů a proteinů a strukturně významných disulfidových můstků. V kapitole tři je podrobně popsána metodika experimentu ROA a zpracování spekter a je zmíněn postup měření spekter elektronového cirkulárního dichroismu (ECD). V Kapitole 4 jsou pak uvedeny původní výsledky autorky. Za velmi významný považuji úspěšný pokus o měření ROA spekter v oblasti valenčních vodíkových vibrací, což je oblast pomocí techniky ROA neprozkoumaná a doposud opomíjená. Nelze tedy než souhlasit s autorkou, že by bylo velmi vhodné měření v této oblasti rozvíjet, neboť získané výsledky mohou být důležitým testem teoretických metod zaměřených na výpočet anharmonických korekcí vibračních spekter. Velmi zajímavá je také rozsáhlá kapitola zaměřená na studium a identifikaci charakteristických znaků disulfidových můstků, byla naměřena a analyzována spektra řady molekul obsahujících tento motiv a autorka podle mého názoru velmi dobře identifikuje oblasti, v kterých přináší ROA zcela nové informace, tak i realisticky hodnotí situace, ve kterých bude signál disulfidové vazby jen velmi těžko rozpoznatelný.

Uvedl bych jen dvě připomínky: 1) V úvodní části mohla být teorie měření elektronového cirkulárního dichroismu (ECD) podrobněji popsána, stejně jako vztah mezi ECD a ROA. V uvedených spektrech ECD autorka kombinuje hodnoty rozdílu molárních extinkčních koeficientů $\Delta\epsilon$ a molární elipticity $[\theta]$, často i v jednom obrázku (obr. 4.15 a 4.19), aniž by byl vysvětlen důvod a je tak mírně ztíženo přímé porovnání uvedených spekter. 2) V obr. 4.5 by na ose y měly být zobrazeny číselné hodnoty, neboť u Δ -spekter jde o významnou bezrozměrnou veličinu, která je přímo porovnatelná u měření prováděných za různých experimentálních podmínek, i s vypočtenými spektry. Chybějící číselné hodnoty na y-ose je možno vytknout také u obr. 4.4. – absolutní hodnoty Ramanových a ROA intenzit nemají sice přímý význam, ale jejich poměr je signifikantní.

Celkově práci hodnotím jako velmi zdařilou, byla prezentována řada původních výsledků i inovativní experimentální postupy.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) Dovoluji si požádat autorku, aby se vyjádřila k zmiňované připomínce týkající se ECD.
- 2) V úvodní kapitole je na str. 32 uvedeno, že hlavním problémem při měření koncentrovaných roztoků je cena vzorků a jejich dostupnost. Je možno identifikovat ještě další závažnou obtíž, která s vysokými koncentracemi nutnými pro měření ROA u řady vzorků (obzvláště proteinů) souvisí?
- 3) Jak je možno vysvětlit velmi rozdílnou hladinu šumu u spekter v obr. 4.5 v oblasti nad 1500 cm^{-1} , když v obr. 4.4a tak velký rozdíl pozorován není?

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: Glasgow, 3. září 2000

