

Posudek na diplomovou práci Václava Navrátila:  
*Studium variantních forem lidské glutamátcarboxypeptidázy II  
kombinací experimentálních a teoretických metod.*

Pan Václav Navrátil se ve své práci úspěšně zhostil náročného úkolu týkajícího se studia enzymatických center GCpeptidáz. Práce se skládá jak z experimentální části, tak i části výpočetní, což samo o sobě vzbuzuje respekt.

Pro řešení výpočetní části zadané práce použil diplomant kombinované QM/MM metody z laboratoře U. Rudého ComQum a tzv. klastrového modelu zahrnujícího vliv prostředí pomocí implicitního solventu. Pro optimalizaci elektronové hustoty zvolených systémů použil metody DFT s PBE funkciónálem a SVP bázovými funkcemi AO. Pro energetické analýzy tzv. SP výpočtů pak pro porovnání využil dalších funkciónálů např. relativně často v literatuře využívaného hybridního funkciónálu B3LYP.

Z diskuze je patrné, že diplomant zvládl několikero experimentálních technik stejně jako nástroje kvantové chemie. Postup práce je adekvátní zvolenému tématu a použité programy ComQum, Tubomol, AMBER představují vhodné nástroje pro zpracování zadané úlohy. Osobně bych považoval za užitečné, kdyby bylo v některé z úvodních kapitol věnováno několik odstavců detailnějšímu popisu těchto programů a obdobně i používaným přístrojům. Nicméně i v této formě je však již předložená diplomová práce úctyhodné dílo s rozsahem přes 90 stran.

Co se týče formálních náležitostí, vnější úpravy, vzhledu a přehlednosti textu je možno konstatovat, že práce je opravdu velmi kvalitní.

Za „kosmetickou“ vadu práce považuji některé (zřídka) chyby např. 4-tý vzorec na str. 15 zůstal po zformátování práce nedokončený a druhý vzorec na str. 24 obsahuje drobnou chybičku v indexu gradientu celkové energie na levé straně.

Jako námět do diskuze bych požádal diplomanta o shrnutí výhod a nedostatků metody QM/MM ve srovnání s klastrovým modelem.

Z předložené práce je zcela zřejmé, že diplomant úspěšně zvládl používanou metodiku a prokázal, že je schopen ji aplikovat na studované systémy.

Za tvořivý přístup studenta k zadanému úkolu, zvládnutí nezbytného vybavení jak experimentálního tak i výpočetního včetně potřebného teoretického zázemí a za úspěšně provedené praktické i počítačové experimenty v diplomové práci navrhuji její ohodnocení stupněm výborná.

---

V Praze, 22.9. 2009

---

Doc. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc.