

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek konzultanta posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Bc. Martina Zámečnicková

Název práce: Studium biologicky relevantních systémů v elektronicky excitovaných stavech

Studijní program a obor: Fyzika, obor Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2014

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Dana Nachtigallová, PhD.

Pracoviště: ÚOCHB AV ČR

Kontaktní e-mail: dana.nachtigallova@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 má standardní rozsah. První kapitola je věnována přehledu teoretických základů a metodiky používané k popisu vlastností excitovaných stavů izolovaných a interagujících chromofórů. Problematika je diskutována v souvislosti se studiem chování excitovaných stavů složitých biologických systémů, konkrétně nukleových kyselin. Druhá kapitola je věnována diskusi výsledků studia dynamického chování modelového systému N-methylformamidu a vlivu molekul vody na povahu excitovaných stavů.

Při práci na projektu musela autorka zvládnout použití pokročilých výpočetních metod, včetně metod multi-referenčního popisu elektronicky excitovaných stavů a metody pro popis neadiabatické dynamiky. Pro zdárné dokončení diplomové práce musela autorka rovněž nastudovat poměrně široký rozsah odborné literatury, zahrnující především problematiku excitovaných stavů bází nukleových kyselin a problematiku interakce chromofórů v excitovaných stavech.

Slečna Zámečnicková se projevila jako talentovaná a zodpovědná studentka schopná samostatné práce. Originální přístup slečny Zámečnickové spočíval zejména v analýze dynamiky charakteru excitovaných stavů a ve studiu vlivu molekul vody na charakter excitovaných stavů, konkrétně na rozsah jejich delokalizace. Tato otázka je stále živě diskutována a pro biologicky relevantní molekuly např. nukleové kyseliny není dosud objasněna.

Diplomová práce, jak její teoretická část, tak část zabývající se diskusí výsledků ukazuje, že se slečna Zámečnicková velmi dobře orientuje v poměrně rozsáhlé literatuře týkající se této tematiky a že problematiku velmi dobře zvládla a pochopila.

Slečna Zámečnicková je spoluautorkou (první autorkou) článku připravovaného k publikaci. Její diplomová práce je dle mého názoru vynikající a bezpochyby splňuje všechny požadavky na diplomovou práci kladené, po její obhajobě tedy vřele doporučuji udělení magisterského titulu.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha 24.4.2014