

Posudek diplomové práce Bc. Jakuba Jungwirtha:

*Application of chiroptical techniques for exploration of inhomogeneous systems*

Diplomová práce se zabývá v první části studiem dipeptidu alanin-alanin a v druhé části práce studiem vláknové struktury amyloidu lysozomu vaječného bílku. Společným jmenovatelem obou částí je metoda použitá ke studiu zvolených systémů: měření Ramanovy optické aktivity (ROA).

V úvodních kapitolách autor přehledně diskutuje experimentální aspekty techniky ROA. Zde jsou stručně, nicméně dostatečně jasně, popsány základní principy metody včetně schematického uspořádání ROA spektrometru. Dále je pak rozebrán teoretický přístup k technice ROA a ukázáno, jak předpovídat experimentální spektra pomocí výpočetní chemie. V tomto oddíle jsou rovněž zmíněny výhody a nevýhody různých výpočetních modelů.

Kapitola 4 se zabývá diskuzí konformačního studia systému alanin-alanin. Nejprve jsou shrnuty výsledky a závěry starších studií a naznačen důvod proč je důležité se tímto tématem zabývat. Dále jsou popsány detaily experimentálního zpracování a výpočetní modely na jejichž základě bylo ROA spektrum stanoveno "in silico". V diskuzi výsledků jsou pak pro (tři) různé hodnoty pH porovnány různé přístupy k predikci experimentálních hodnot.

V kapitole 5 je obdobným způsobem jako v kapitole 4 uvedeno zasazení zvoleného systému do kontextu dosavadních výsledků. Získaná data, byť naměřená na unikátní aparatuře, však vyžadují ještě další propracování, aby dokázala poskytnout nový pohled do struktury amyloidového vlákna. To však nelze autorovi diplomové práce vyčítat z časových důvodů i z důvodů komplexnosti zvoleného problému.

Velmi oceňuji též poslední oddíl kapitol 4 a 5, kde je explicitně uvedeno, co udělal autor sám a co je dílem spolupracovníků.

K práci mám technickou otázku:

na str.30 je diskutován lineární posun spektrálních hodnot tak, aby se maximalizoval překryv s experimentálními daty. Pak jsou uvedeny získané hodnoty parametrů a, b. Dále je řečeno, že zastoupení jednotlivých konformérů bylo rovněž získáno (přesněji než z Boltzmannových váhových faktorů) z fitu na experimentální průběh spektra.

Nevedlo by k dalšímu (asi malému) zpřesnění vypočtených spekter spojení obou procedur a optimalizování všech 6 parametrů současně?

Komentář ke "Spektrálnímu rozkladu" na str. 34, 1. odst.:

V tomto případě jsou k dispozici pouze 4 konforméry, relativně zřetelně energeticky oddělené. Pak tedy lze zcela jistě začít s delším krokem a ušetřit tak výpočetní čas. Nicméně pro větší počet minim by tímto způsobem bylo možné `nejzajímavější` minimum opominout.

Závěrem bych chtěl konstatovat, že předložená diplomová práce představuje velice kvalitní dílo, které splňuje všechny požadavky na diplomovou práci. Rád ji doporučuji k obhajobě a navrhuji klasifikovat ji stupněm výborně.

V Praze, 25. 5. 2017

Prof. Jaroslav Burda, DrSc.