

Ústav organické chemie a biochemie Akademie věd ČR

RNDr. Jan Konvalinka CSc.
Skupina proteas lidských pathogenů
Flemingovo n. 2
konval@uochb.cas.cz
166 10 Praha 6

Telefon +220 183 218
fax +220 183 578
e-mail

Posudek na bakalářskou práci Martina Štefla „Kinetika interakce cytochromu P450 s oxidem uhelnatým“

Bakalářská práce Martina Štefla se zabývá zpracováním výsledků spektroskopických měření komplexu hemové domény NO-synthasy s oxidem uhelnatým. Samotné měření Ramanových spekter tohoto komplexu nebylo předmětem práce, naměřená spektra byla dodána školitelem. Autor práce se zabýval jejich teoretickým vyhodnocením, speciálně spektrálním rozkladem komplexních spektroskopických píků odpovídajících „stretching“ vibraci vazby mezi atomem železa a uhlíkovým atomem CO (Fe-CO).

Práce má rozsáhlý úvod do problematiky, který seznamuje čtenáře s aktuálním stavem výzkumu v oboru. Tato část je zpracována velmi přehledně a nepochybně může sloužit do laboratoře nově příchozím studentům k rámcovému seznámení s tímto odvětvím biochemie a biofyziky. Je napsána srozumitelně a čtivě, ocenit lze i minimum překlepů a gramatických i stylistických chyb.

V průběhu vlastní práce autora bylo vyhodnocováno celkem 9 sérií Ramanových spekter výše uvedeného komplexu, lišících se typem ligandu na atomu železa a tím, který faktor ovlivňující stabilitu komplexu byl proměnný a který konstantní (těmito faktory byly výkon laseru a frekvence rotace kyvety.) Z každého spektra byl vybrán příslušný pík a metodami spektrální analýzy rozložen do lineární kombinace ideálních píků reprezentovaných Lorentzovou funkcí. Těmto píkům byly přiřazeny vlnočty a podle závislosti na proměnném faktoru bylo posouzeno, zda se jedná o vibraci vazby Fe-CO, nebo vibraci skeletální. Tato data pak tvořila závěr práce.

K práci mám několik připomínek a dotazů, jak formálního, tak věcného rázu.

Formální:

1. Název práce je poněkud zavádějící, jelikož v ní samotné žádná kinetika studována není.
2. Grafy na str. 17 jsou pro drobné písmo málo čitelné.
3. Na str. 20, 5. řádek zdola, se hovoří o práci „Chabina a jeho skupiny“. Chybí zde však odkaz na citaci a ani v seznamu literatury žádná odpovídající citace není uvedena.
4. Na str. 21, 4. řádek je uvedeno, že reakce se účastní 0,5 mol NADPH. Toto vyjádření je nesprávné. Buď je třeba uvést, že toto množství připadá na 1 mol reakčního obratu, nebo raději napsat 0,5 molekuly, což lze intuitivně vztáhnout na zapsaný stechiometrický rozsah. 0,5 mol vyjadřuje konkrétní látkové množství, odpovídající v tomto případě cca 372 g NADPH.
5. Na str. 35 používá autor spojení „energie laseru“ na str. 41 pak „intenzita laseru“, přičemž jednotkou uvedené veličiny jsou mW. Mělo by se tedy hovořit o „výkonu laseru“.

6. V textu jsem nikde nenašel odkaz na citaci č. 22, mohl jsem se nicméně přehlédnout. Autor ji patrně opomněl nedopatřením, jelikož všechny ostatní odkazy jsou uvedeny správně.

Věcné:

1. Na str. 30 a 31 je poněkud nepřesný popis Gaussových a Lorentzových funkcí používaných jako modely píků. Není např. jasné, co vlastně autor rozumí slovem amplituda. Pokud si matně vzpomínám, konvenčně tento pojem znamená maximum dané funkce. Proto pojmy jako „střed amplitudy“, „šířka amplitudy“ nebo „plocha amplitudy“ mi nedávají žádný smysl.
2. Metodickou část pojímá autor jako jakýsi uživatelský manuál, v němž popisuje, kam je třeba v jednotlivých případech kliknout myší. To považuji za ne zcela vhodné. Určitým nedostatkem práce je to, že nás autor neseznamuje s použitými matematickými metodami. Uvádí pouze typové označení programu, kterým byly analýzy provedeny, ale nedodává ani popis metod, ani citaci na příslušnou literaturu, v níž je program popsán. Na str. 46 autor píše o tom, že zastoupení určitých píků stoupá nebo klesá „při změnách“ určitých faktorů. Toto vyjádření nedává žádný smysl, dokud se neuvede, o jaké změny se jedná. Zastoupení píku může např. růst s „rostoucí“ intenzitou záření, ale ne s „měnící se“ intenzitou záření.
3. Nakonec bych se rád zeptal, zda a jakým způsobem byla testována stabilita numerického řešení a proč není uveden žádný údaj o chybách provedených spektrálních rozkladů. Jelikož se výpočty zakládají na experimentálních datech, měla by být tato informace uvedena. S tím souvisí také dotaz, zda např. odlišnost prvních dvou sérií (SF/ED a SF/RD), a v menší míře také posledních dvou (SB/ED/7-NI a SB/RD/7-NI), nemůže být pouhým matematickým artefaktem. Tyto dvojice sérií totiž pracují se stejným fyzikálně-chemickým systémem, ale výsledky se do značné míry liší, a to i v případech, kdy se hodnoty proměnných veličin v obou sériích dané dvojice shodují.

Přes výše uvedené připomínky považuji práci za velmi solidní a plně ji doporučuji k obhajobě.

V Praze, 15.6. 2006

Jan Konvalinka

