

Lukáš Trantírek, Ph.D.
Biologická fakulta
Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Branišovská 31
370 05 České Budějovice

Posudek školitele na magisterskou práci

Bc. Eva Brumovská

Studium vztahů mezi lokální strukturou nukleových kyselin a jejichmi spektrálními projevy: Tenzor chemického stínění

Úkolem diplomové práce Bc. Evy Brumovské bylo zmapování vztahů mezi lokální strukturou nukleových kyselin a tenzorem chemického stínění izotopu uhlíku ^{13}C a dusíku ^{15}N . Znalost těchto vztahů je jedním ze základních předpokladů pro strukturní interpretaci mnoha parametrů spekter nukleární magnetické rezonance (NMR) nukleových kyselin (NK). Vlastním cílem práce bylo zmapovat vliv konformace cukerného kruhu a orientace glykosidického torzního úhlu na velikost, tvar a orientaci tenzoru chemického stínění u DNA a RNA nukleosidů. K tomuto účelu Eva použila data z kvantově-chemických výpočtů. Data pro DNA nukleosidy byla poskytnuta Dr. V. Sychrovským (UOCHB AV ČR, Praha). Pro RNA nukleosidy Eva provedla výpočty sama. Při vlastní analýze se Eva soustředila na zmapování vztahů mezi lokální strukturou NK a anisotropií a orientací tenzoru chemického stínění na jednotlivých uhlíkových a dusíkových atomech hetero-aromatického a cukerného kruhu DNA a RNA nukleosidů. Získané závislosti jsou přímo použitelné při plánování NMR experimentů, interpretaci tzv. auto- a kros-relaxačních dat a interpretaci reziduálních anisotropií chemického posunu. Data zpracovaná Evou jsou v současné době připravována k publikaci pro *Journal of the American Chemical Society* (IF=6.9), kde Eva Brumovská figuruje jako prvoautor.

Eva Brumovská při své práci prokázala obdivuhodnou sebekázně a vytrvalost při náročném, a často i stereotypním, zpracovávání značně rozsáhlého souboru dat. Při práci postupovala vždy samostatně, zodpovědně a systematicky. Velmi dobře se orientovala v multi-disciplinární literatuře. Eva má podle mne všechny nezbytné předpoklady pro vědeckou práci. Doporučuji, aby byla její magisterská práce hodnocena jako výborná.

Lukáš Trantírek, Ph.D.

školitel

