

Oponentský posudek bakalářské práce Ingrid Romancové

Slečna Ingrid Romancová vypracovala svou bakalářskou práci na téma Theoretical Study of tautomeric Forms of Uracil and Their Interactions with Mg^{2+} . Velmi kladně hodnotím, že práce je napsána v anglickém jazyce, stylisticky jasně a pouze s malým množstvím překlepů. Celková délka práce (68 stran) výrazně převyšuje standardní rozsah. Samotný úvod zabírá 32 stran, přičemž kapitoly věnované kvantové chemii jsou psány fundovaně se znalostmi výrazně překračujícími základní kurz kvantové chemie. Rovněž množství dosažených výsledků svědčí o velké péči studentky a vymyká se běžné bakalářské práci.

První část výsledků se týká studia tautomerní rovnováhy uracilu bez a v přítomnosti hořečnatého kationtu metodou DFT a MP2. Vzhledem k tomu, že problematika tautomerizace bází byla v literatuře již mnohokrát studována, překvapila mě absence diskuze získaných výsledků se známými daty. V práci je pouze uvedeno v grafické podobě na obr. 23 srovnání struktur a stabilizačních energií uracilu a thyminu v přítomnosti hořčíku s prací Kabeláče a Hobzy, zatímco jakýkoliv slovní komentář týkající se porovnání získaných a dříve publikovaných dat chybí. Rovněž některé tabulky jsou příliš rozsáhlé a pro čtenáře nepřehledné. Vhodnější by bylo vybrat a diskutovat pouze nejvíce stálé konformery a zbylá data umístit do přílohy.

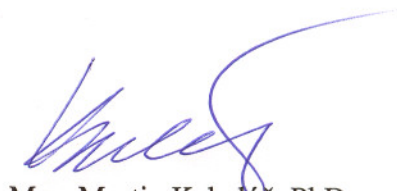
Vědecky zajímavější a objevnější je pak další část, která se věnuje interakci thyminu a uracilu s hořčíkem, kdy kation je solvatován. Autorka zde srovnává stabilitu různých vazebných motivů hydratovaného hořčíku na bázi, přičemž ion se může vázat na bázi buď přímo, nebo nepřímo prostřednictvím molekuly vody.

Celkově hodnotím práci Ingrid Romancové přes výše uvedené výhrady jako kvalitní a doporučuji ji k obhajobě.

Otázky k obhajobě:

1. Jak výrazně se odlišují vypočtené hodnoty interakčních energií různých tautomerů uracilu a thyminu za a bez přítomnosti iontu od dříve publikovaných dat?
2. Dal by se pro studium podobných systémů použít empirický potenciál, např Amber? Jaké přednosti a naopak nedostatky by měla tato metoda?

V Praze , 20.5.2009



Mgr. Martin Kabeláč, PhD.