

**Posudek školitele na bakalářskou práci Ingrid Romancové: „Theoretical Study of
Tautomeric Forms of Uracil and Their Interactions with Mg²⁺“**

Ingrid Romancová mě kontaktovala již koncem prvního ročníku a od počátku projevovала velký zájem o molekulové modelování. Mým původním záměrem bylo, aby slečna Romancová spočítala relativní energie všech tautomerů izolovaného uracilu a uracilu s navázaným Mg²⁺ iontem pomocí programu Gaussian03 a tyto porovнала s již publikovanými výsledky pro thymin. Vzhledem k velké pracovitosti slečny Romancové bylo možné práci ještě rozšířit o studium vlivu hydratace iontu kovu na relativní stabilitu tautomerů a provést první výpočty s navázaným fosfátem. Slečna Romancová navíc z vlastní iniciativy provedla všechny výpočty a analýzy také pro thymin, čímž si dobrovolně zdvojnásobila objem vykonané práce. Bakalářská práce je sepsána v anglickém jazyce v rozsahu odpovídajícím spíše diplomové práci.

Slečna Romancová prokázala velkou cílevědomost a schopnost samostatně pracovat, a proto navrhuji to nejlepší možné ohodnocení její bakalářské práce.

V Českých Budějovicích, dne 21.5.2009



Zdeněk Chval