

Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: **Bc. Lydie Plačková**

Název práce: **Použitelnost výpočetních metod kvantové chemie pro studium interakcí v biologických systémech**

Studijní program a obor: **Biofyzika**

Rok odevzdání: **2016**

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: **Mgr. David Řeha, PhD**

Pracoviště: **CNSB, MBU AVČR, Nové Hrady**

Kontaktní e-mail: **reha@nh.cas.cz**

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Předložená diplomová práce má 53 stran a je psána v českém jazyce. Zabývá se testováním řady různých semiempirických metod na několika modelových systémech. Cílem práce bylo určit nepřesnosti jednotlivých semiempirických metod pro různé skupiny chemických molekul a jejich interakcí (intramolekulární interakce, interakce mezi různými typy molekul, či interakce molekul s ionty) a navrhnout která semiempirická metoda by byla nejvhodnější pro náročné výpočty složitějších systémů. Toto je jednoznačně velmi přínosné pro komunitu výpočetních chemiků, neboť to usnadní výběr vhodné semiempirické metody pro konkrétní systém, kde je použití pokročilých *ab initio* metod příliš výpočetně náročné, ale kde klasické MM metody neobstojí.

Po obsahové stránce práce splnila vytyčené cíle. Autorka zvládla nastudovat a aplikovat složité kvantově chemické výpočty, včetně velmi náročných výpočtů CCSD(T) a také pochopit podstatu jednotlivých semiempirických aproximací. Dále autorka zvládla práci s geometrií chemických systémů a analýzy energetických profilů (včetně 3D grafů).

Práce je celkem rozumně členěná, zvláště oceňuji velmi podrobné zpracování a popis jednotlivých kvantově-chemických metod v teoretické části práce, včetně podstaty jednotlivých semiempirických aproximací. Na druhou stranu mi připadá, že úvod teoretické části je příliš stručný a chybí diskuze o jiných podobných pracích zabývajících se testováním různých semiempirických metod. Jako další nedostatek předložené práce považuji příliš stručný závěr. Chybí zde diskuze pro jaké systémy a jaké typy výpočtů (např. MD simulace pomocí semiempirických metod) je vhodné použít konkrétní semiempirickou metodu. Další problémem je kapitola Metody, ze které není úplně jasné, jak byly získány jednotlivé geometrie systémů. Další drobnou výhradu bych měl k tomu, že autorka se u popisu metody AM1 (str 13) odkazuje na metodu MNDO, která ale není popsána (jen je napsáno, že je odvozena z NDDO).

Po formální stránce mám jen drobné výhrady k seznamu použité literatury, kde jsou některé reference (1,4) omylem zarovnány do bloku, což zhoršuje čitelnost. Dále je použit poněkud neobvyklý formát referencí, kde u prvního autora je uvedeno jako první příjmení a u ostatních je příjmení poslední.

I přes výše uvedené nedostatky hodnotím tuto práci příznivě a doporučuji k obhajobě.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Jak byly získány geometrie komplexů (dimeru vody, benzenu a metanu)? V práci v kapitole Metody (str 23) je napsáno: „Optimalizované struktury jednotlivých molekul byly získány na úrovni DFT s bází aug-cc-pVDZ“. Byly tedy optimalizované jednotlivé monomery a ty pak kombinovány do dimerů, nebo byly optimalizovány dimery? Dále bych se zeptal jaký DFT funkcionál byl použit při výpočtech geometrie v tomto případě? Předpokládám, že to byl B3LYP, nicméně ho autorka opomenula napsat.
2. Poprosil bych autorku o diskuzi na téma využitelnosti semiempirických metod pro jednotlivé systémy při použití SE MD simulací. Uveďte prosím příklady jednotlivých systémů. V jakých případech lze doporučit SE MD a v jakých případech ne. Kdy raději použít klasické MD simulace založené na MM.

Práci

doporučuji

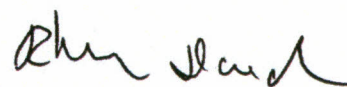
nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: V Nových Hradech, 6.1.2017



Mgr. David Řeha, Ph.D.

Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: **Bc. PLAČKOVÁ Lydie**

Název práce: **Použitelnost výpočetních metod kvantové chemie pro studium interakcí v biologických systémech**

Studijní program a obor: **Ústav fyziky a biofyziky PŘF JU**

Rok odevzdání: **2016**

Jméno a tituly oponenta: **RNDr. Martin Lepšík, Ph.D.**

Pracoviště: **Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR, v.v.i.**

Kontaktní e-mail: **lepsik@uochb.cas.cz**

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Diplomová práce Bc. Lydie Plačkové zpracovává velmi aktuální téma použitelnosti semiempirických kvantově chemických metod v oblasti výpočetní chemie. V teoretické části autorka přístupným způsobem zpracovala nelehkou tematiku kvantové mechaniky a kvantově

chemických metod. Ve výsledkové části Bc. Lydie Plačková prezentuje množství vlastních výpočtů a kriticky je zhodnocuje. V závěru autorka definuje oblasti použitelnosti semiempirických kvantově chemických metod v souladu s vytčenými cíli.

Nedostatky práce spatřuji ve formálním zpracování. Převádění anglických termínů do češtiny považuji za nedostatečné, nesprávné či málo kreativní – často jsou anglické termíny uvedeny bez uvozovek, aniž by se autorka snažila o překlad/vysvětlení, např. v poznámce pod čarou (viz např. str. 8, kap. 2.3.2.2 „Split-valence báze sety“ by se daly popsat jako „báze s odděleným popisem valenčních orbitalů“). V seznamu zkratk naopak anglické termíny chybějí. Anglicismem je např. „Born-Oppenheimerova“, má být „Bornova-Oppenheimerova“ (Pozor: když jde o jednu osobu s dvojitým jménem, tvar vypadá např. takto: „Lennard-Jonesův potenciál“). Též termín „báze sety“ považuji za nešťastný, používal bych spíše „sada báze funkcí“, které tvoří např. „minimální bázi“.

Je škoda, že kvalitní výsledky nejsou prezentovány odpovídajícím způsobem. Jde hlavně o kvalitu, velikost a popisky grafů. Mnohde by se dalo ušetřit místo ukázáním legendy jen pro jeden z podobných grafů. Vyšší přehlednost tabulek by zajistilo zachování pouze čáry oddělující hlavičku od dat a někdy prezentace na výšku (např. Tab. 4, 5). V některých tabulkách jsou desetinné tečky místo čárek.

Závěrem i přes formální nedostatky hodnotím práci jako velmi zdařilou a užitečnou pro další výzkum a **doporučuji ji k obhajobě.**

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Jak vysvětlujete přeskok protonu u salicylátu, který však vede k vyšší energii (sekce 3.3.1.)?

Práci

doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta:

V Praze dne 8.1. 2017



RNDr. Martin Lepšík, Ph.D.