

Oponentský posudek diplomové práce Bc. Ivany Berkové: Strukturní studie
halogenalkandehalogenasy DgaA z *Glacieocola agarilytica* NO₂

Vypracoval: doc. Ing. Petr Kolenko, Ph.D.

Předložená diplomová práce o celkovém rozsahu 60-ti stran se skládá z krátkého úvodu (2 strany, teoretického úvodu (25 stran), popisu užitého materiálu a metod (10 stran), výsledků experimentů (10 stran), krátké diskuze (4 strany) a jednostranného shrnutí doplněného o obsáhlý seznam literatury použité k vypracování této práce.

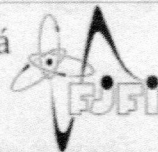
Již literární přehled obsahuje mnoho nedostatků, které nesvědčí o dobře provedené práci. Například tvrzení o objeviteli paprsků X, které nazval dle svého jména. Autorka se sice snaží používat maximum českých ekvivalentů k termínům, které ještě nejsou pevně v jazyce ukotveny, to oceňuji, nicméně logická výstavba vět a jejich smysl je mnohdy velmi nepřesný, zavádějící, nebo přímo nepravdivý. Například na stranách 8 až 9 je třikrát opakováno zavedení krystalové mříže a elementární buňky. Násobné opakování je rovněž na straně 11 a týká se tentokrát strukturního faktoru a rozptylu paprsků X na ozářené hmotě. Další opakování se nachází na straně 15 a týká se stavby modelu proteinu do mapy elektronové hustoty. Opakování sebe sama je rovněž na straně 19 a týká se programů zpracování dat.

Secce Materiál a metody postrádá zvyklosti, které se v oboru běžně vyskytují, ale v tomto smyslu se jedná o pouhé drobnosti, např. „mosfilm“ na straně 29. Obrázky na stránkách 31 a 33 jsou po grafické úpravě (vymazání detailů) zcela bezcenné a pokud chtěla autorka něco sdělit, lze tyto omezené informace uvést v rámci jedné věty v hlavním textu.

Zatímco předchozí kapitoly byly v nadneseném smyslu nepřesné, kapitola Experimentální výsledky si v některých částech navzájem přímo odporuje. Především informace o rozlišení z kapitol 4.1 a 4.2. Také počet snímků neodpovídá oscilačnímu úhlu. Na straně 40 text vybízí k interpretaci, že upřesněním molekuly se rozumí především vylepšení jejích geometrických parametrů.

Kapitola Diskuze shrnuje dosažené výsledky a porovnává je s dřívějšími pozorováními. Zde bych vytkl autorce využívání PDB kódů na místo názvů jednotlivých proteinů a jejich organismů. Kapitola Závěr stručně shrnuje celou práci. Zde bych vytkl snad jen zápis prostorové grupy.

Kapitola Literatura je místy nekonzistentní s textem (Židek 2005 vs. Židek 2015). Přesto je zde jasné, že studentka čerpala z velkého množství převážně aktuální literatury a to rozhodně velmi oceňuji.



Břehová 7 115 19 Praha 1

Předložená práce Ivany Berkové se zabývá aktuálním tématem, neboť ekologie a ochrana životního prostředí oprávněně hraje ve společnosti významnou úlohu. Nutno říci, že z textu vyplývá vysoká náročnost tematiky a samotného zkoumaného problému. Je rovněž zřejmé, že všech stanovených výzkumných cílů bylo dosaženo. Výsledky jsou z vědeckého i aplikačního hlediska cenné. To ukazuje nejen na kvalitu vedení práce, úroveň experimentální zázemí, ale také na fakt, že studentka sama je schopna se náročných procesů řešení struktury rentgenovou difrakcí úspěšně účastnit. Bohužel předložený text ve velké míře odhaluje nedostatky samostatné tvůrčí schopnosti, která je nezbytným předpokladem absolventa magisterského studia.

Pro doporučení práce k obhajobě požaduji odpověď na následující otázky:

- 1) Prosím při obhajobě opravit vzorec pro výpočet elektronové hustoty (strana 12).
- 2) Jaký je rozdíl mezi krystalem bez navázaného těžkého kovu a nativním krystalem na straně 14?
- 3) Pokud rentgenové záření prochází krystalem netečně vůči elektronům, k jakému typu interakce tedy dochází? Jak lze spočítat elektronovou hustotu (strana 14)?
- 4) Prosím opravit formulaci „ Δ nabývají na hodnotě“ ze strany 15.
- 5) Jakým způsobem program XDSAPP vytváří mapu elektronové hustoty (strana 19)?
- 6) Prosím o vyjasnění rozlišení užitých difrakčních dat, které je velmi rozporuplné v rámci celé práce.
- 7) Na straně 42 je uvedeno, že struktura obsahuje jeden hlavní a jeden postranní řetězec. Který?

I přes správné zodpovězení mých dotazů nemohu navrhnout lepší hodnocení, než dostatečné k obhajobě.

Petr Kolář

V Praze dne 7. 1. 2020