

Oponentní posudek diplomové práce Bc. Barbory Sedmidubské

„Interakce nízkoenergetických elektronů s izolovanými a hydratovanými biomolekulami“

Úkolem diplomové práce bylo prostudovat fragmentaci vybraných biomolekul (aminokyselin L-cystein, L- valin a amidů formamid a N-methylacetamid) po disociativním záchytu nízkoenergetických elektronů a to jak v izolovaném stavu, tak ve vodných klastrech při různých energiích elektronů.

Po formální stránce má práce všechny náležitosti. Na 75 stranách je členěna do šesti hlavních částí (Úvod-17 s., Experimentální studie-14 s., Výsledky a diskuse-27 s., Závěrečná diskuse-3 s., Závěr-1 s., Literatura-6s.) kvalitně provedenými 10 obrázky a 21 grafy a 78 citacemi původních článků od 60. let minulého století do současnosti publikovaných téměř výlučně v mezinárodních renomovaných odborných časopisech. Je potěšitelné, že v době počítačů je v ní zanedbatelné množství překlepů. Z formálního hlediska chci poukázat na několik následujících skutečností. Místo školitel-specialista má být formálně správně konzultant (i v poděkování). Citace uváděné v textu je logičtější dávat před tečku ukončující větu. Je zde několik nešikovných, zkratkových nebo neúplných formulací jako například: ...v buňce podstupující ozařování... (Abstrakt); ...vzniká H^* a OH^* ... (Úvod); ...bez ohledu na m/z letících iontů...; lze měřit m/z molekul... (Kap. 2.1.1); ...elektrony jsou urychleny na konečné napětí 3,7 kV... (Kap. 2.2.1); ...relativní intenzity aniontů...(Obr. 3.4). Na Obr. 2.1 (zřejmě převzatého, ale bez citace) jsou části experimentálního zařízení Cluster Beam Apparatus (CLUB) označeny zkratkovými symboly bez vysvětlení jejich významu. Popis os některých obrázků je neúplný (obr. 2.6, 2.8, 2.9-2.12, 3.1 a další). Na obr. 3.5(a) anionu ($OH^- + H_2O$) zřejmě odpovídá pík o hodnotě poměru m/z = 79, nikoliv 35, kdežto hodnotě m/z = 35 přísluší anion $H_3O_2^-$. Některá tvrzení v práci jsou neúplná, například: Produkty interakce IZ s hmotou nejsou jen ionty a sekundární nízkoenergetické elektrony, významnou část (až 50 %) tvoří excitované stavy (Úvod). V krystalických látkách kromě vakancí a dislokací vznikají také částice v intersticiálních polohách a významnou složku tvoří nábojové poruchy (Kap. 1.1). Charakterizace pružného rozptylu z hlediska zachování energie soustavy by měla být korigována (Kap. 1.3).

Z věcného hlediska Kapitola 1. (Úvod do problematiky) představuje obecné pojednání o různých aspektech studované problematiky, přičemž některé části již byly zpracovány ve Výzkumném úkolu. Šíře a hloubka tohoto pojednání je dána velikostí souboru použitých zdrojů, které jsou v dnešní době téměř neomezené a tak větší význam, než popisné pojednání má kritické hodnocení dosud nalezených skutečností. Na toto hodnocení však ani u zkušených autorů mnohdy nebývá soustředěná pozornost, takže i zde lze pouze konstatovat, že by bylo žádoucí danou problematiku hodnotit více z hlediska tématu dané práce. Dle názvu by se tento přístup dal očekávat zejména v Kapitole 1.4 (Motivace pro studii DEA na vybraných biomolekulách), ale i zde se jedná v podstatě o popis disociativního záchytu elektronu a vlastností vybraných sloučenin. Naproti tomu pozitivně lze hodnotit přehledný a relativně důsledný popis obou typů experimentálního zařízení (Cluster Beam apparatus a elektronový záchytový spektrometr), jejich kalibraci a rozlišení. Pozitivně lze hodnotit zejména snahu autorky získaná spektra interpretovat. To nikdy není jednoduchý úkol a bezezbytková interpretace je možná jen u jednoduchých systémů a je spíše vzácností. S tím zřejmě souvisí i nejisté formulace typu „aniont o hmotě 45 Da by mohl být...“ nebo poměr „m/z = 35 by mohl odpovídat...“ (Kap. 3.2) či „...by mohlo být...“, nebo „...by mohlo patřit...“ (Kap. 3.4).

Vysoce hodnotím snahu autorky diskutovat nalezené výsledky (například diskuse studia DEA na molekulách L-valinu v hydratovaném prostředí je široká a zajímavá) a snahu konfrontovat je s výsledky jiných autorů (pokusy s L-valinem v Bratislavě a v Berlíně, formamidem v Brémách a Innsbrucku, N-methylacetamidem v Japonsku). Zde se mi zdá detailní popis experimentů na těchto pracovištích až nadbytečný a jde na úkor kritického zhodnocení nalezených rozdílů, i když snahu o prezentaci těchto rozdílů nelze upřít. Netradičně je v práci na závěr zařazena Závěrečná diskuse, v níž je na začátku dobře formulován závěr práce. Následný komentář týkající se výsledků jiných autorů je zde nadbytečný, neboť v něm se rozplývá výrazná odpověď na položenou otázku „jaký je přínos této práce?“ Tento „nedostatek“ je kompenzován ve vlastním Závěru práce, kde po zbytečném popisu všeho, co bylo v práci prováděno, jsou explicitně uvedeny čtyři zásadní výsledky, kterých bylo v práci dosaženo. Z nich jednoznačně vyplývá, že bohatá experimentální práce, kterou diplomantka vykonala, a její kritické zhodnocení přineslo bezpochyby nové poznatky v oblasti ovlivnění vybraných biomolekul záchytem pomalých elektronů.

Na závěr bych rád položil několik dotazů k zodpovězení během obhajoby:

- Měření, která byla provedena v rámci VU (L-cystein, L-valin?) jsou všude takto označena?
- V některých grafech jsou experimentální body prokládány spojitou křivkou, v jiných jsou spojovány úsečkami. Má to svůj důvod?
- Co bylo kritériem pro volbu vybraných dvou konkrétních aminokyselin a dvou amidů?
- Co určovalo teploty zahřívání jednotlivých látek v zařízení CLUB (rozdíly jsou pouze několik stupňů) (kap. 2.1.1)?
- Je problém kondenzace L-cysteinu zásadní, a jak bude řešen?
- Je vyloučení možnosti oxidace L-cysteinu provedením měření s jiným vzorkem (jakým?) hodnověrné (kap. 3.1, s. 43)?
- Je skutečně stagnace tlaku v závislosti tlaku na teplotě napouštěcího systému elektronového záchytového spektrometru v oblasti teplot 145-150 °C (obr. 3.3) tak výrazná, že je možné ji považovat za znak rozkladu izolovaného L-cysteinu, i když dle literárních dat k tomuto rozkladu dochází až při teplotě 216 °C?
- Bylo by možné provést analogická měření v kladném módu a zmapovat tak kladné ionty?

Závěrem mohu konstatovat, že předložená diplomová práce představuje velký soubor cenných výsledků poctivě odvedené práce. Tyto výsledky byly adekvátně vyhodnoceny. Proto mohu konstatovat, že všechny tři vytčené úkoly byly splněny. Na základě toho doporučuji předloženou diplomovou práci Bc Barbory Sedmidubské k dalšímu řízení.

V případě zodpovězení všech uplatněných připomínek a dotazů navrhuji práci klasifikovat známkou **A – výborně**.

V Praze, 2. 9. 2020

Prof. Ing. Viliam Múčka, DrSc
oponent