

**UNIVERZITA KARLOVA
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ**

Katedra organické a bioorganické chemie

Studijní program: Farmacie

Posudek oponenta diplomové práce

Autor/ka práce: **Jakub Radek Štoček**

Vedoucí/školitel/ka práce: Doc. PharmDr. Jiří Kuneš, CSc.

Konzultant/ka práce: Doc. RNDr. Martin Dračínský, Ph.D.

Rok obhajoby: 2020

Oponent/ka práce: Prof. Ing. Antonín Lyčka, DrSc.

Název práce:

Interactions of modified nucleobases studied by NMR spectroscopy

Rozsah práce: počet stran: 45, počet obrázků: 28, počet tabulek: 4, počet citací: 49

Práce je: experimentální

- a) Cíl práce je: zcela splněn
- b) Jazyková a grafická úroveň: velmi dobrá
- c) Zpracování teoretické části: výborné
- d) Popis metod: výborný
- e) Prezentace výsledků: výborná
- f) Diskuse, závěry: výborné
- g) Teoretický či praktický přínos práce: výborný

Doporučuji diplomovou práci k uznání jako práci rigorózní

Případné poznámky k hodnocení: Posuzovaná magisterská práce se sepsána anglicky a sestává se ze 45 stran textu. Spolu s magisterskou prací jsem obdržel kopie dvou publikací.

Členění diplomové práce je standardní. Stručně jsou charakterizovány postupně aspekty NMR, výpočetní metody, vodíková vazba, konformační izomerie a tautomerie. Následují výsledky týkající se vývoje metody pro určení volné Gibbsovy energie párování nukleobazí na základě rotamerních rovnováh různých derivátů 2-(methylamino)pyrimidinu a druhá část se zabývá tautomerií analogů guaninu. Na konci práce je uvedena Technická a experimentální část a 49 odkazů na literaturu.

Při posuzování rozsahu jednotlivých kapitol může čtenář podlehnout klamnému dojmu, že proporcionální podíl teorie oproti výsledkům je příliš velký. Důvodem je, že výsledky jsou sepsány velmi úspornou formou používanou v odborných publikacích, a dále fakt, že k získání jednotlivých výsledků bylo třeba provést řadu velmi pracných a časově náročných teplotních experimentů a odpovídajících výpočtů.

Získané výsledky byly publikovány ve dvou odborných časopisech, kde byly podrobeny důkladné kontrole. Případné chyby byly proto odstraněny a já už nemám žádné zásadnější připomínky ani výhrady. Snad jen některé vzorce, mohly být větší (např. ve Figure 4.3 mohly být vzorce prezentovány ve dvou řadách, aby mohly být větší, totéž se týká Figure 5.10, i dalších). Oceňuji výběr aktuálního tématu a jeho důležitost. Výsledky jsou zpracovány přehledně a stejně tak přehledně, kromě velikosti několika vzorců, prezentovány. Domnívám

se, že publikace mají šanci být často citovány, protože vykazují originální přístup k řešení, a jsou z oblasti výzkumu, ve které je aktivních mnoho výzkumníků.

Závěr:

Výsledky magisterské diplomové práce byly publikovány ve dvou publikacích ve velmi prestižních časopisech s vysokým IF: Chemical Communications a Biomolecules. Magisterskou práci Jakuba Radka Štočka považuji jednoznačně za nadstandardní jak z hlediska rozsahu tak odborné úrovně. Diplomant je u obou prací prvním autorem.

Dotazy a připomínky: Vzhledem k tomu, že výsledky byly publikovány ve dvou odborných časopisech s vysokým IF, kde byly podrobeny důkladné kontrole, nemám žádné doplňující otázky

Celkové hodnocení, práce je: výborná, k obhajobě: doporučuji

V Hradci Králové dne 20.5. 2020

.....
podpis oponentky / oponenta