

Posudek dizertační práce T. Zimmermanna nadepsané „Theoretical description of the metal-ion interactions with models of amino acids and oligopeptides“

Předložená práce se zabývá modelováním reakcí některých důležitých platinových komplexů pomocí metod kvantové chemie. Jádro práce je tvořeno reprinty a preprinty celkem 4 publikací, dvě práce z toho jsou již publikované, dvě jsou k publikaci podány. Kandidátova práce tak již částečně prošla odbornou recenzí. Větší část dizertace je věnována studiu reakcí produktů hydrolýzy cisplatiny s aminokyselinami obsahujícími síru. Menší část je pak zaměřena na studium hydrolýzy farmakologicky významných platinových komplexů.

Výše zmíněné kopie 4 publikací jsou uvozeny asi 50-ti stránkovým textem, ve kterém autor jedna podává motivaci ke svému tématu a dále v přiměřeném rozsahu popisuje použité teoretické přístupy. Samotným výsledkům je v průvodním textu věnováno možná méně místa, než by si zasloužily, v důsledku čehož působí text v tomto místě poněkud nesourodě. Např. na str. 47 je uveden vztah pro výpočet rychlostní konstanty, avšak tyto nejsou dále diskutovány, lehce neorganický mi přijde přechod ze str. 41 na str. 42 atp. Závěr dobře shrnuje dosavadní výsledky, na tomto místě bych možná ještě uvítal diskuzi biofyzikálního významu autorovy studie.

V práci by bylo možné nalézt některé formální nedostatky, např. určitá typografická nedůslednost (ne vždy použita kurzíva pro fyzikální veličiny), příliš se mi nezamlouvají grafy 3.5-3.7 „interpolující“ mezi H_2O a N, vztah 3.8 má špatně znaménko. Angličtina této dizertace je srozumitelná a bez většího množství závažných chyb.

Práce po mém soudu splňuje všechny potřebné parametry nutné k úspěšné obhajobě a doporučuji ji proto k přijetí.

V rámci diskuze by se kandidát mohl dále vyjádřit k následujícím otázkám:

- Jakou roli hraje pro energetiku studovaných reakcí vibrační delokalizace, tj. jak se změní či nezmění reakční energie po zahrnutí vibrací?

- Je možné podat vysvětlení, proč pro výpočet BDE funguje nejlépe funkcionál B3LYP? Ten byl vybrán srovnáním s metodou CCSD(T) pro jednu konkrétní bázi. Byla prozkoumána závislost reakční energie na velikosti báze?
- Dost často je možné vylepšit modely typu PCM explicitním zahrnutím několika nejbližích molekul rozpouštědla. Jinou možností zahrnutí vlivu rozpouštědla jsou metody na bázi QM/MM. Vedly by takové přístupy k vylepšení výpočtu pKa?

Plymouth, 28.7. 2008

RNDr. Petr Slaviček, Ph. D.