

Zápis z obhajoby disertační práce Mgr. Tomáše Zimmermanna

s názvem

Theoretical Description of the Metal-Ion Interactions with Models of Amino Acids and Oligopeptides

Obhajoba byla zahájena dne 2. 9. 2008 v 9:00. Komise se sešla v usnášeníschopném počtu 10 členů:

Předseda:	Doc. RNDr. V. Baumruk, DrSc.
Členové:	Prof. RNDr. I. Barvák, DrSc. RNDr. P. Bouř, CSc. Doc. RNDr. R. Grill, CSc. Doc. RNDr. P. Chvosta, CSc. Prof. RNDr. Z. Herman, DrSc. Doc. RNDr. P. Mojžeš, CSc. Doc. RNDr. J. Fišer, CSc.
Školitel:	Doc. RNDr. Ing. J. Burda, CSc.
Oponenti:	RNDr. P. Slavíček, Ph.D. RNDr. V. Sychrovský, Ph.D.

Prof. Ing. K. Dušek, DrSc svojí neúčast omluvil.

Předseda komise konstatoval, že kandidát na doktorský titul předložil všechny požadované písemnosti a že školitel a oba oponenti jsou přítomni. Dále byl přečten a nechán kolovat seznam publikací a životopis obhajujícího. Bylo konstatováno, že k předložené práci nebyly dodány žádné připomínky.

Školitel přečetl svůj posudek na obhajovanou práci a doporučil ji k obhájení. Školitel neměl na obhajujícího žádné dotazy. Poté byl obhajující požádán o stručnou prezentaci své práce, což v následujících 30 minutách vykonal.

Oponent RNDr. P. Slavíček, Ph.D přečetl svůj posudek na obhajovanou práci, doporučil ji k obhájení a položil následující dotazy:

- 1) Jakou roli hrají ve výpočtech vibrační příspěvky k energiím
- 2) B3LYP funkcionál v metodě DFT byl vybrán podle srovnání s metodou CCSD(T). Proč nebyl výpočet vázanými klastry proveden v úplné bázi?
- 3) Lze použít i jiné metody než ryze implicitní solvent? Proč nebylo zahrnuto několik explicitních

molekul vody?

4) Proč má cisplatina tak vysokou účinnost právě při rakovině varlat?

Oponent konstatoval, že tyto otázky byly obhajujícím uspokojivě zodpovězeny.

Oponent RNDr. V. Sychrovský, Ph.D. přečetl svůj posudek na obhajovanou práci, doporučil ji k obhájení a položil následující dotazy:

- 1) Jaký je přesný výraz termínu "cell line", který byl použit v dizertační práci?
- 2) V časopise Cancer Research vyšla studie věnující se této problematice. Pokud jste tuto studii četl, můžete stručně shrnout o čem pojednává a jaké jsou její závěry?
- 3) Shrňte stručně přístup Vámi nově vyvinuté metody implicitního solventu se zvážením parciálních nábojů.
- 4) Ve Vaší práci se v jednom vzorci pro použitý hamiltonián vyskytuje faktor $\frac{1}{2}$ a na jiném místě tento člen chybí. Je to správně? Proč je zde faktor $\frac{1}{2}$?
- 5) V dizertační práci je na dvou místech uvedena různá přesnost výpočetní metody, kterou používáte. Jaká je její skutečná přesnost?

Oponent konstatoval, že tyto otázky byly obhajujícím uspokojivě zodpovězeny.

V následující volné diskuzi byly vznešeny tyto otázky:

- 1) Proč je aminoskupina obtížná pro použití implicitního modelu?
- 2) Dá se odhadnout vliv mikrohydratace na velikost aktivačních energií?
- 3) Je cisplatina komplex platnatý nebo platičitý?
- 4) Jak se změní minimum funkce $G(\text{pH})$ v závislosti na teplotě?
- 5) Velikost kavity je závislá na náboji, ale náboj je závislý na velikosti kavity. Je toto nějak ve vašich výpočtech řešeno?

Otázky byly obhajujícím zodpovězeny.

Následovala neveřejná porada komise, po které bylo oznámeno, že se komise hlasováním v poměru 10 z 10 přítomných členů rozhodla udělit obhajujícímu titul Ph.D.

V Praze dne 2. 9. 2008



Zapsal: Mgr. Zdeněk FÚTERA