

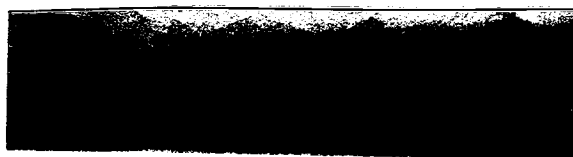
## Posudek školitele

Kristýna Pluháčková vypracovala na našem oddělení diplomovou práci na téma „Ab initio quantum chemical calculations on peptides and biomolecular complexes in the gas phase.“ Studie navazuje na rozsáhlý projekt studia peptidů v plynné fázi, kterého se autorka aktivně účastní již řadu let. Podstatou problému je skutečnost, že empirické potenciály nejsou schopny popsat povrch potenciálních energie peptidů. Tyto povrchy obsahují velký počet minim a proto je třeba generovat první odhad pomocí metod molekulové dynamiky. Finální výpočty musí být naopak provedeny pomocí nejpřesnějších metod kvantové chemie, podobně jako u molekulových komplexů.

Autorka provedla řadu výpočtů povrchů jak peptidů tak i molekulárních komplexů a používala různé metody včetně „on-the-fly“ ab initio molekulově dynamických simulací. Významnou část diplomové práce tvoří výpočty energetických bariér mezi minimy u tripeptidu. Kristýna Pluháčková pracovala samostatně a velmi dobře uplatnil své přírodovědné znalosti. Diplomová práce vyústila do sestavení dvou publikací, které byly zaslány do časopisu Physical Chemistry Chemical Physics (práce vyšla v roce 2008) a Journal of Chemical Theory and Computation (práce je v tisku); třetí publikace je v přípravě. Kromě uvedených prací autorka publikovala ještě další tři studie.

Diplomová práce je velmi kvalitní a navrhuji ji hodnotit jako výbornou.

V Praze 25. května 2009



Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc, FRSC