

Posudek na diplomovou práci slečny Bc. Petry Matunové:  
"Studium termodynamických a kinetických parametrů interakcí oligomerních modelů  
DNK s organokovovými komplexy aktivními v protirakovinné léčbě stanovených  
metodami kvantové chemie a kombinovanými QM/MM metodami."

Slečna Matunová začala pracovat na své diplomové práci v průběhu 1. ročníku magisterského studia v r. 2012. V druhém roce odjela na půlroční pobyt do Stockholmu, který si i přes můj negativní postoj prodloužila do konce školního roku. Její přístup k prováděným výpočtům byl po celou dobu velice chaotický, s velkým množstvím elementárních chyb. To i přes její značnou pracovitost způsobilo posunutí termínu odevzdání práce až do současné doby.

I přes moje naléhání napsat diplomovou práci v českém jazyce se slečna Matunová rozhodla pro její sepsání anglicky. Musím bohužel konstatovat, že výsledek její snahy umožnit i zahraničním badatelům nahlédnout do její práce dopadl více než velmi tragicky. Velké množství nekorektních výrazů, které jsou přesným překladem z češtiny do angličtiny a kdy je v anglické literatuře používán jiný termín, možná působí na první pohled úsměvně, nicméně skutečnost, že tato práce vznikla v naší laboratoři mi naplňuje velkou trpkostí. Na svoji obranu bych chtěl říci, že množství oprav, které by bylo nutno provést, by se rozhodně neslučovalo s tvrzením, že práce byla sepsána samostatně. Tudíž jsem se k anglickému projevu, byť hrubě nerad, nevyjadřoval.

Další problém jsem měl s formulováním teoretického úvodu, kde jsem očekával něco ve smyslu samostatného přepracování učebnicové látky. Bohužel i v tomto bodu jsem se dočkal nepříjemného překvapení, které, jak doufám, alespoň částečně vyplynulo z použití anglického jazyka. Nicméně hned v kapitole 1.1.4 (str. 11) stojí: „It is convenient to solve the time independent Schrödinger equation with the wave function  $\psi(x)$  represented with a suitable set of basis functions. ...( $\phi(x)$ )...“ To však považuji za velmi nepřesné až chybné tvrzení, protože v tomto kontextu má autorka na mysli mnohaelektronové řešení Schrödingrový rovnice, které nelze předpokládat ve tvaru jednoelektronové funkce, tj. MO, jak je dále ve vzorci pro MO-LCAO aproximaci uvedeno. Podobně pokračuje na str. 14 – 3-4 řádka shora, kde naprosto nesmyslně prohlásí dvouelektronové repulzní integrály v reprezentaci atomových orbitalů:  $(\mu\nu|\lambda\sigma)$  a  $(\mu\sigma|\lambda\nu)$  za Coulombův a výměnný integrál. To je naprosto nepochopení Hartreeho-Fockovy metody! Teprve odpovídající suma takovýchto dvouelektronových repulzních integrálů  $(\mu\nu|\lambda\sigma)$  vede na Coulombův nebo výměnný integrál. Jako poslední ukázkou uvádím výrok ze strany 18, poslední část kapitoly 1.1: „If the Kohn-Sham orbitals were the same as the Hartree-Fock orbitals, the exchange energy would be the same as the energy computed by the Hartree-Fock method.“ Tento výrok je uveden pod použitím LDA funkcionálu, ale lze směle prohlásit, že toto tvrzení nebude obecně splněno pro žádný funkcionál. Vždyť jde o naprosto odlišný výpočet výměnného členu, jak by něco takového mohlo platit! Nevím odkud tuto větu autorka opsala, ale jsem si jist, že ji opsala nepřesně a daná kniha v podstatě říká něco zcela jiného. Naneštěstí bych takto mohl ještě pokračovat neboť teoretický úvod obsahuje mimo kapitoly 1.1 další části až do 1.7.

K samotným výpočtům nic zásadního nemám. Vše, co bylo spočteno špatně, bylo později, často po mojí intervenci, opraveno. Jen ještě jednou musím poukázat na chaotičnost diplomantky, která přestože správně v závěru kapitoly 1.5 uvedla vzorec pro výpočet rychlostní konstanty, do něho dosadila namísto aktivačních energií energie

reakční. Že dané reakce v případě platinových komplexů proběží rychlostí  $10^{16} \text{ s}^{-1}$  a rychleji (čili rychleji než je frekvence jakéhokoli vibračního módu jakékoli myslitelné molekuly) ji nikterak nevadilo. Stejnou chybu pak automaticky (copy-paste) zopakovala rovněž u komplexů ruthenia s guaninem.

Diplomovou práci i přes mnohé výhrady doporučuji k obhajobě a navrhuji ji klasifikovat jako dobrou.

V Praze 25.8. 2015

Prof. Jaroslav Burda, DrSc.