

Recenzní posudek doktorské práce Matěje Pavelky nazvané "Theoretical Study of Ligand Field Influence on Physico-chemical Behavior of Cooper Cations Cu(I)/Cu(II)".

Práce je orientována do oblasti biofyziky a strukturní biologie organometalických biologicky zajímavých látek. Autor se soustředil na komplexy jednomocné a dvojmocné mědi, tedy na komplexy prvku, který ani zdaleka nepatří k těm, jejichž chování v biologických systémech by bylo dobře prozkoumáno.

Práce členěna do 4 částí jak je to obvyklé u časopiseckých sdělení, tedy úvod, metody, výsledky a závěry. Výsledky jsou podloženy publikovanými pracemi. Problém interakcí mědi v biologických systémech je studován v rovině hydratace, interakce s peptidovým prostředím jako modelem bílkovin, interakce s DNA a RNA bázemi jako modelem nukleových kyselin a interakce ve vybraných komplexech mědi. Práce je sepsána v dobře čitelné angličtině. Jedinou vadou na kráse jinak velmi pěkně a logicky poskládané práce je včlenění oddílu o cis-platině. Dlužno dodat, že z hlediska vyprodukovaného výkonu ji uchazeč z důvodů „kvantitativních“ nemusel uvádět. Disertační práce by pak byla jasně monotematická, a autorovy zásluhy by se nijak nesnížily, protože tato práce by stejně byla uvedena v seznamu publikací. Nebo měl autor jiný úmysl, když publikaci o platině do své PhD práce vkládal ?

K práci mám následující dotazy a připomínky:

1. Ve výčtu metod autor zmiňuje základy používaných metod. Dělá to velmi racionálně a stručně, někdy snad až příliš stručně. Celá pasáž nicméně zřetelně naznačuje, že se autor v používaných metodách vyzná. Mezi jiným hovoří i o Coupled Clusters. Použil autor tuto úroveň teorie na nějaké systémy? Pokud ano, jaké bylo srovnání s HF či MP2 a jaké s DFT metodami?
2. Práce se zdá být pečlivě zkontrolována předtím, než byla svázána. Také její grafické provedení je výborné. Přesto se nevyhnula „tiskařským šotkům“, např. na straně 14 dole.
3. Při modelování komplexů jednomocné mědi s více než dvěma molekulami vody je vidět, a též píše autor, že třetí molekula vody už může volit raději druhou solvatační vrstvu. Zajímalo by mne (nejen) v této souvislosti, jak generoval autor vstupní konfigurace pro výpočet a to zejména pro systémy s větším počtem vod. Stejnou otázku bych položil pro systémy, kde byla voda a amoniak a pak i síra.
4. Velmi zajímavé jsou výpočty redoxních vlastností ve vakuu a v prostředí „polarizovaného kontinuum modelu“ (COSMO). Obrázek 3.13 na str. 25 pak ukazuje, jaké jsou vypočítané ionizační potenciály získané z původních a optimalizovaných proteinových struktur. Ve třech případech mají data získaná z nativních struktur tendenci údaj podhodnocovat. Jinak jo to pouze v případě d). Je pro to nějaké vysvětlení?
5. Poslední dotaz se týká souvislosti výpočtů s interpretací EPR spekter. Tu ukazuje autor na příkladu spolupráce s pracovištěm ve Stuttgartu. Zajímalo by mně, zda bylo takových experimentálních studií provedeno více a jak dopadly (včetně té zmíněné).

Závěrem bych rád konstatoval, že práce, kterou autor předkládá, je zpracována v důležité a vědecky zajímavé oblasti (letmý dotaz kolik proteinů obsahujících měď je v databázích 3-D struktur mi dal číslo téměř 500). Autor prokázal orientaci v oblasti, a to zejména z hlediska metodické stránky problému, ale nejen tam. Znam autora i z vystoupení na konferencích. A tak mohu na závěr konstatovat, že předložená práce splňuje požadavky kladené na disertační práci absolventa doktorského studia, doporučuji práci k obhajobě a po jejím úspěšném absolvování doporučuji kandidátovi udělit titul Ph.D.

V Brně dne 26.2.2007