



ÚOCHB ^{AV}
^{ČR}
IOCB PRAGUE

Ústav organické chemie a biochemie
Akademie věd České republiky, v. v. i.
Institute of Organic Chemistry and Biochemistry
of the Czech Academy of Sciences

Univerzita Karlova, Praha

Vyjádření školitele k disertační práci:

RNDr. Jana Hudecová: Theory and application of optical spectroscopic methods for structural molecular studies

Ve své práci doktorka Jana Hudecová použila několik pokročilých chirooptických metod pro zkoumání struktury molekul a jejich interakcí. Důraz byl kladen na rozvoj metodiky, tak, aby výsledky byly obecně použitelné. Experimentální výsledky, pokud to bylo možné, byly interpretovány na podkladě často velice komplexního teoretického modelování. Domníváme se tak, že práce přispívá k rozvoji těchto spektroskopických technik, zaměřených zejména na výzkum biologicky relevantních molekul. Stejně tak i rozšiřuje i současné metody simulací vlastností molekul, založené na kombinaci kvantově-chemických a molekulárně-dynamických postupů.

V prvních částech práce je tématika zasazena do širšího kontextu, jako je chiralita molekul, a jsou zde popsány příbuzné experimentální a teoretické postupy. Vlastní práce je soustředěna okolo čtyřech originálních publikací. V první z nich je zkoumána vysoce aktuální problematika, simulace spekter roztoků pomocí „klastrů“ molekul získaných pomocí molekulové dynamiky. Článek ukazuje, jak je možné výpočetní postup optimalizovat a získat spektra dobře odpovídající experimentu.

Dalším tématem je interpretace tzv. anharmonické oblasti ve vibračních spektrech. Výsledky ukazují, že i pro tuto teoreticky i experimentálně obtížně uchopitelnou oblast lze získat chirální spektra a poměrně dobře je vysvětlit na podkladě kvantově-chemických výpočtů.

Třetím tématem je více „aplikovaný“ výzkum, zkoumání chirooptických vlastností modelového peptidu obsahující tryptofan. Tato aminokyselina obsahuje zajímavý chromofor, ale k jeho využití pro strukturní studie je potřeba překonat několik překážek, např. jeho nestabilitu při měření, což se v práci alespoň částečně podařilo. Konečně ve čtvrté části je zkoumána interakce peptidů obsahujících histidin a organokovových komplexů; pomocí molekulárně dynamických modelů se podařilo alespoň částečně vysvětlit data získaná použitím cirkulárně polarizované luminiscence.

J. Hudecová je ovšem spoluautorka i několika dalších publikací, které jsou v dizertaci jen zmíněny, ale ke kterým také rozhodujícím podílem přinejmenším přispěla.

Vlastní dizertace je psána srozumitelnou angličtinou, byť samozřejmě s handicapem nerodilého mluvčího. Teoretický úvod je možná až příliš podrobný a u mnoha částí nemusí být jasné, jak souvisejí s hlavním tématem. Přes pečlivé členění kapitol, značení obrázků, apod. se domnívám, že grafická úprava by mohla být ještě lepší, návaznost kapitol propracovanější a podíl originálních obrazů větší.

Přes tyto drobnosti jsem přesvědčen, že dizertace jednoznačně dokumentuje precizní práci autorky a její schopnost samostatně vědecky pracovat. Snad je také z práce patrný její pečlivý přístup k řešeným tématům, zaujetí pro studovanou tematiku, a schopnost spolupracovat s mnoha kolegy doma i v zahraničí. Dizertaci, která splňuje všechny zákonné i odborné požadavky, tak doporučuji k obhajobě.

Praha, 10. 9. 2018

Prof. RNDr. Petr Bouř, DSc.