

**Posudek na doktorskou práci Mgr. Lucie Zendlové:
„Noncovalent Interactions in the Gas-Phase and Aqueous Solution:
Theoretical Study“**

Předložená práce se zabývá třemi oblastmi výpočetních simulací:

- a) mikrosolvatací GC a AT párů bází jednou a dvěma molekulami různých rozpouštědel,
- b) interkalacemi hydrofobních bází do oligomerní sekvence DNK a
- c) redoxními vlastnostmi organokovových komplexů ruthenia a osmia, které mohou být použity jako značky purinových bází.

Práce se skládá z úvodního textu (v rozsahu 50-ti stránek), který je doplněn přílohou obsahující 6 původních studií. Zde je dizertantka ve třech případech první autorkou.

Úvod je napsán v anglickém jazyce s dobrou grafickou úpravou a minimálním množstvím gramatických chyb. Nicméně jsem v teoretickém úvodu našel řadu drobných nepřesností, např. „HF molecular wavefunction is built as a(n antisymmetrized) product of mono-electronic functions“. Obdobně nepovažuji za „improve(d) theoretical procedures“ metodu lokální korelační energie ani RI techniku. Jsou to spíše efektivní aproximace, které urychlují výpočty. Vzorec (15) pravděpodobně neobsahuje na levé straně energii optimalizovaného komplexu, ale součet deformačních energií daného systému.

Jako námět do diskuze bych položil dotaz, který se týká nutnosti použití DFT-D techniky pro zpřesnění výpočtů energií slabě vazaných systémů. Jaká fyzikální skutečnost stojí za selháním DFT technik v těchto případech, které autorka správně popisuje v posledním odstavci části 2.3.4.?

Druhý dotaz by se pak týkal skutečnosti, co by dále ještě mohlo stát za faktem, že experimentální výsledky v případě modifikovaných B-B párů dávají nižší stabilizační energii (porovnáním teplot tání) než sekvence samotných kanonických párů bází (kromě entropických faktorů zmíněných v publikaci).

Z příložených článků je patrná značná komplexnost studované problematiky. Navíc moje práci oponenta byla do značné míry usnadněna skutečností, že všechny uvedené studie prošly náročným recenzním řízením v tak prestižních časopisech jako je např. JPC B.

Závěrem bych chtěl konstatovat, že není pochyb o vědecké kvalitě předložené práce stejně jako o uchazeččiných vědomostech v oblasti molekulárních výpočtů. Proto doporučuji práci k obhajově a po jejím úspěšném průběhu udělení titulu „Philosophiæ Doctor“.



Doc. Jaroslav Burda

V Praze, 20.5.2008