

## **Vyjádření školitele k doktorské práci**

### **Výpočty parametrů spekter NMR a jejich užití ve strukturním modelování biomolekul**

**RNDr. Zuzany Vokáčové**

RNDr. Zuzana Vokáčová se začala z vlastní iniciativy problematikou výpočtů NMR parametrů intenzivně zabývat již během svého magisterského studia, což mělo příznivý vliv na její rychlou orientaci v problematice. Od začátku svého doktorského studia pracovala velmi svědomitě a iniciativně se podílela na několika výzkumných projektech. Velice rád konstatuji, že prokázala schopnost řešit samostatně vědecké problémy.

Doktorská práce RNDr. Zuzany Vokáčové obsahuje souhrn výsledků získaných během čtyř let doktorského studia, které byly publikovány v mezinárodních vědeckých časopisech, prezentovány na mezinárodních a domácích konferencích (osmkrát přednáška, třikrát poster). Dalším důležitým aspektem doktorského studia RNDr. Zuzany Vokáčové byly dva krátkodobé pobyt v zahraničních laboratořích (Prof. Kenneth Ruud, University Tromso, Norsko a Prof. Matthias Bickelhaupt, Vrije University Amsterdam, Holandsko) a jeden tuzemský (Prof. Jiří Šponer, BDÚ AVČR, Brno). V rámci zahraniční spolupráce byla již publikována jedna práce a další se připravuje. Díky pobytu v laboratoři Prof. Šponera se RNDr. Zuzany Vokáčová naučila výpočetní metodu pro výpočty dynamických vlastností molekul, kterou pak samostatně aplikovala při výpočtu NMR parametrů v RNA dinukleosidech.

Doktorská práce RNDr. Zuzany Vokáčové popisuje zejména teoretické výpočty NMR parametrů a jejich strukturní interpretaci pro modelové systémy nukleových kyselin, které tvoří hlavní část doktorského vědeckého projektu. Vztah mezi naměřenými NMR parametry a strukturou molekul je obvykle odvozen na základě empirických pravidel, která mohou v zásadě poskytnout dobrý strukturní model. Teoretické výpočty NMR parametrů však mají zásadní význam pro validaci těchto empirických pravidel, zkoumání různých vlivů na NMR spektra (komplexní strukturní faktory, dynamika molekul, vliv solventu atp.) a eventuelně i pro předpovědi vlastností takových NMR parametrů, jejichž nejednoznačná strukturní interpretace znemožňuje v současné době jejich využití. Výsledky dosažené v rámci

doktorského projektu v tomto smyslu představují nové informace, které najdou uplatnění v oblasti strukturního studia nukleových kyselin pomocí NMR. Kromě výpočtů NMR parametrů v nukleových kyselinách RNDr. Zuzana Vokáčová dále spolupracovala na řešení dalších vědeckých projektů, které se týkaly teoretických výpočtů NMR parametrů v peptidech, spektroskopických vlastností pigmentů molekul fotosystému a výpočtů struktury molekul. Díky tomu lze vědecký program doktorského studia RNDr. Zuzany Vokáčové považovat za komplexní.

RNDr. Zuzana Vokáčová splnila během doktorského studia řádně všechny studijní požadavky, aktivně a samostatně pracovala na několika vědeckých projektech a to i v rámci zahraničních pobytů a výsledky doktorské práce publikované v mezinárodních časopisech prezentovala na několika konferencích. Doktorskou práci RNDr. Zuzany Vokáčové proto jednoznačně doporučuji k obhajobě.

Dr. Vladimír Sychrovský (školitel)

