

Univerzita Karlova, Praha,
Matematicko-fyzikální fakulta
děkanát-studijní oddělení-doktorské studium
Ke Karlovu 3, 121 16 Praha 2

Posudek disertační práce

Praha 10.7.2012

Název práce: Interakce kovových iontů v bioorganickém prostředí; kvantově-chemická a molekulově-mechanická výpočetní studie

Autor: RNDr. Zdeněk Futera

Katedra: Katedra chemické fyziky a optiky

Vedoucí doktorské práce: Prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc.

RNDr. Zdeněk Futera předkládá kvalitní výpočetní studii zaměřenou na reaktivitu rutheniových komplexů, vzhledem k jejich použití v lékařství. Jedná se o aktuální téma, neboť podrobné porozumění chování molekul může v budoucnu usnadnit vývoj nových biologicky aktivních látek. V práci jsou tvořivě použity moderní postupy kvantové a molekulové mechaniky, a je podložena několika publikacemi, z velké části již uveřejněnými v prestižních časopisech.

Hlavní přínos studie spočívá v systematickém zmapování komplexotvorných vlastností rutheniových solí, reakčních mechanismů, a způsobů vazby na molekulu DNA. Neméně hodnotné je srovnání více výpočetních metod, diskuze jejich předností, a podrobná analýza výsledků. Velice nadějná je dobrá shoda vypočtených energetických rozdílů s experimentálními daty.

Velice sympatické také je, že se autor nespokojil s dostupným softwarovým vybavením, ale vyvinul vlastní výpočetní nástroje. Ty mu umožnily použít kombinované QM/MM výpočetní metody lépe adaptované na studované systémy.

Práce je psána velice kultivovanou angličtinou se zanedbatelným množstvím gramatických a stylistických chyb (např. more heavier místo heavier, apod.).

Připomínky se proto týkají několika minoritních a formálních záležitostí:

- v úvodu není jasné, proč je tolik prostoru vyhrazeno cisplatině; naopak bych uvítal širší úvod do použitých výpočetních metod
- z teoretické části je patrné, že autor diskutovaným tématům rozumí; o to větší pozornost mohl věnovat důslednějšímu vysvětlení všech symbolů, např. okolo rovnic (11) nebo (17)

- pod rovnicí (24) chybí, že v atomových jednotkách je také Planckova konstantna rovna jedné
- kapitola 2.2.1. (BO aproximace) mi nepřipadá příliš dobře vysvětlena; není např. jasné že rovnice (25) se týká jen elektronové části
- stejně tak 2.2.2. (LCAO), měla by také logicky následovat až po zavedení Slaterových determinantů
- i s některé části v 2.2.4 jsou nepřesné; např. se inzeruje že Hamiltonián je určen hustotou, která v (44) není, nebo hlavní výhoda KS aproximace, dobrý popis kinetické energie, je zamlžena
- v práci se uvádí (str. 57), že DFT neumí disperzní interakce. Proč tedy nebyla použita DFT-D, s empirickými korekcemi? Proč nebyla použita novější verze Gaussianu (09 místo 03)?
- předá autor vyvinutý software dalším studentům, uvažuje např. o vytvoření webové stránky, kde by se dal stáhnout?

Velký záběr práce, poctivé zpracování, a dobré výsledky naznačují, že autor téma dobře zvládnul. Rozhodně se domnívám, že RNDr. Zdeněk Futera prokázal schopnost tvořivé vědecké práce, a disertaci, která splňuje všechny zákonné i odborné požadavky, doporučuji k obhajobě.

S pozdravem,

Petr Bouř

Ústav organické chemie a biochemie,

Akademie věd České republiky,

Flemingovo nám. 2, 16610 Praha 6.

Email: bour@uochb.cas.cz, Tel.: (+420) 220183348