

Posudek na habilitační práci **RNDr. Martina Dračínského, Ph.D**

„Vývoj experimentálních a teoretických metod NMR spektroskopie pro studium struktury a dynamiky molekul.“

Předložená habilitační práce je založena na souboru 14 kvalitních prací, které vyšly v prestižních recenzovaných časopisech. Z tohoto počtu je předkladatel v 11 článcích prvním autorem a ve 2 případech autorem posledním. To jasně ukazuje na jeho vysoký příspěvek v daném souboru prací. Tato skutečnost do značné míry rovněž usnadnila moji roli oponenta.

Práce jako celek působí velmi kompaktním dojmem. V podstatě je rozdělena do dvou základních částí. V první se autor zabývá fyzikálními základy NMR spektroskopie, jejími různými typy a teoretickým výpočtem NMR parametrů. Osobně bych v této části očekával trochu hlubší pohled jak do fyzikální podstaty metody (dvě rovnice není mnoho) tak i v části 2.4 Výpočty NMR parametrů, kde by mohlo být zmíněno alespoň základní nastínění poruchového výpočtu. Nicméně na druhou stranu chápu snahu autora o nekomplikovaný náhled do problematiky.

V druhé části pak shrnuje vlastní výsledky získané v této oblasti. Zejména se soustředil na ovlivnění NMR parametrů v důsledku dynamického chování molekul a na studium struktury a dynamiky různých modelů a modifikací nukleových kyselin (NA). Významný přínos spatřuji v porovnání různých solvatačních modelů včetně molekulárně dynamického přístupu, který je třeba považovat za nejpřesnější, speciálně je-li nejbližší solvatační obálka zahrnuta do kvantově-mechanického popisu zkoumané molekuly. Rovněž velmi vysoko je nutné hodnotit i studium modifikovaných složek NA, které je prováděno v návaznosti na dlouholetou tradici výzkumu léčiv na ÚOCHB. Závěry z prací, kde se autor zabývá NMR spektry různými modifikacemi 5-Nitrosopyrimidinů, mohou mít dalekosáhlý význam např. v oblasti farmakologie.

Náměty k případné diskuzi:

V úvodní pasáži na str. 2 je věta, se kterou mám trochu problém. "...NMR spektroskopie zároveň umožňuje studovat dynamické chování molekul v celém rozsahu možných rychlostí. ..." Chtěl bych se zeptat autora jak tomuto výroku porozumnět z pohledu relativně pomalé odezvy standardní NMR spektroskopie.

Malý komentář k Tab. 1: asi by stálo za úvahu zahrnout kromě PCM modelu a MD přístupu i kombinovaný (klastrový) model s např. explicitní 1. hydratační obálkou, i když je zřejmá značná komplikace v důsledku středování přes statistický soubor většího počtu struktur.

Podle mého názoru je kvalita předložené práce velmi vysoká, splňuje všechny požadavky kladené na habilitační práci, a proto navrhuji, po úspěšné obhajobě, udělit autorovi titul docent.

V Praze 27.5.2017

Prof. Jaroslav Burda, DrSc.