Oponentský posudek Ph.D. disertace Jaroslava Rejnka s názvem „Theoretical Study of Nucleic Acid Bases: Tautomerism, Stability and Properties“

Předložená práce je založená na třech publikovaných článcích v předních časopisech a na jedné práci připravované do tisku. Autor se zabývá otázkou participace tautomerních forem bazí na struktuře nukleových kyselin na úrovni studia monomerů a dimerů včetně zahrnutí vlivu hydratace.

Práce je sepsána v anglickém jazyce, je srozumitelně strukturovaná a autor prokázal schopnost vědecké práce v oblasti teoretické chemie na vysoké úrovni. Autor zvládnul všechny potřebné techniky studia jak na úrovni molekulové dynamiky tak na úrovni kvantové chemie.

Prezentované výsledky představují další krok k pochopení role tautomerů, tohoto dlouhodobě studovaného problému.

Celkově docházím k závěru, že autor vykonal velký kus dobré profesionální práce, dokázal své výsledky řádně prezentovat a připravil dobrou disertační práci. Přesto mám několik poznámek k nedokonalostem, které autorovi myslím unikli:

Str. 7, kap. 2.1.2: Tvrzení, že partiční funkce není vhodná k výpočtu volné energie vzhledem k „pomalé konvergenci“ je sice oprávněné, ale bez vysvětlení, co se míní „pomalou konvergencí“ sama věta mnoho neříká.

Str. 7, rovnice 1: Tato rovnice je evidentně chybná, jinak by platilo, že $\Delta G=\Delta V$, jak lze snadno odvodit.

Str. 14, kap. 2.2: Tvrzení, že výpočet interakční energie z rozdílů energie dimeru a monomerů vede k přecenění interakční energie není zcela přesné. nepřesnost je důsledkem aproximací ve výpočtu energií (v tomto případě je míněno použití neúplné báze).

Termín „energy gap“ v kontextu této práce (disertace i teze) by lépe vystihoval termín „energy difference“. Ostatně termín „gap“ má autor v oblibě i pro označení jiných rozdílů (str. 35).

Str. 26, první odstavec: místo „... the most solvent stabilized“ použít přesnější formulaci „... the most water stabilized“. Pro jiné solventy to zajisté bude jiné pořadí.

Str. 35, první odstavec: Co značí „bare“ COSMO technique? Stejného termínu je použito v závěru.

Str. 36, Tab. 7: Označovat odlišnost výsledků hydratace od MD-TI metody jako chybu (error) není opodstatněné. Bylo by to na místě v případě, kdyby se srovnávalo s nepochybnými referenčními daty, např. z experimentu.

Zmatek při čtení působí odlišné pořadí dimerů v obrázku 5 a Tabulce 9, včetně diskuse, kde se používá pořadové číslo struktury. Např. struktura 5 z tabulky je čtvrtou strukturou v obrázku.

V tezích se některé chyby opakují, pravděpodobně byly okopírovány z disertace (např. rovnice 1). Navíc se mi nelíbí slovo „about“ na straně 5 tezí dole (about 4 stable structures, about 20 stable structures“. Co je tím „about“ míněno?

Celkově hodnotím disertaci jako velmi zdařilou a doporučuji ji přijmout jako podklad k udělení titulu Ph.D.

V Praze, 6. 9. 2006

RNDr. Zdeněk Havlas, DrSc.
ÚOCHB AV ČR