

Oponentský posudek disertační práce **Jaroslava Rejneka** nazvané **Theoretical Study of Nucleic Acid Bases: Tautomerism, Stability and Properties**

Předložená disertační práce se zabývá studiem tautomerních forem bazí a párů bazí nukleových kyselin, jejich stabilitou a solvatací za použití výpočetních metod. Práce je rozdělena do pěti kapitol, kde po úvodu následují metody shrnující základní použité výpočetní postupy. Další kapitoly uvádí studované systémy, následují výsledky a závěr. V samotném závěru práce jsou uvedeny literární odkazy a přílohy.

První kapitola se stručně věnuje nosným tématům disertační práce tedy tautomerii a solvataci. Druhá kapitola uvádí stručný teoretický úvod k použitým metodám, zejména metodám pro výpočet solvatační energie. Autor se v této pasáži dopustil několika menších formálních chyb např. v termodynamickém cyklu na str. 9 či nestandardní matematické symbolice v rovnicích (3) a (4). Také tvrzení, že metoda PCM je velmi podobná metodě COSMO není zcela korektní. Domnívám se také, že autor mohl zahrnout do citované literatury nedávné a vynikající review z oblasti publikované autory J. Tomasi, B. Mennucci a R. Cammi v Chem. Rev. 2005 (105, str. 2999-3093). Třetí kapitola popisující studované systémy je následována bohatou výsledkovou částí. K této části bych se rád znal autorův názor na velkou diskrepanci hodnot hydratačních energií vypočtených kontinuálním či klastrově-kontinuálním modelem a termodynamickou integrací zejména pro tautomery guaninu (viz Tab. 8, sl. 4-7). Poslední část výsledkové kapitoly se zabývá aktuální a zajímavou možností existence tautomerních forem párů bazí ve struktuře DNA a tabulka č. 9 pak prezentuje velmi zajímavé výsledky, i když s několika numerickými chybami (viz řádky AT komplex č. 3 a GC komplex č. 8). Autora bych požádal, zda by mohl komentovat velký rozdíl u interakční energie páru AT č. 5, kde je hodnota interakční energie dvojnásobná vzhledem ke všem ostatním AT párům. Hlavní výsledky práce jsou pak jasně a stručně vyjádřeny v závěru práce.

Přílohová část práce obsahuje separáty tří prací, které nedávno publikovaly v renomovaných časopisech výsledky uvedené v disertační práci. Zřejmě nedávné výsledky týkající se párů basí jsou připraveny k publikaci, bohužel však v práci avizovaná příloha D chybí.

Předložená disertační práce obsahuje cenné a kvalitní výsledky, které již jednou prošly náročným recenzím řízením v redakcích odborných časopisů. Výše zmíněné nedostatky jsou převážně formálního charakteru a nesnižují kvalitu práce.

Práci doporučuji k obhajobě.

RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.
Katedra fyzikální chemie
Přírodovědecká fakulta Univerzity Palackého v Olomouci
Tř. Svobody 26, 771 46 Olomouc
tel. +420 58 563 4756
fax +420 58 563 4425
e-mail: otyepka@aix.upol.cz