



ÚOCHB AV ČR

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE A BIOCHEMIE  
AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY  
INSTITUTE OF ORGANIC CHEMISTRY AND BIOCHEMISTRY  
ACADEMY OF SCIENCES OF THE CZECH REPUBLIC

ODDĚLENÍ MOLEKULOVÉHO MODELOVÁNÍ  
DEPARTMENT OF MOLECULAR MODELING

## Posudek školitele

Jaroslav Rejnek vypracoval disertační práci nazvanou „Theoretical Study of Nucleic Acid Bases: Tautomerism, Stability and Properties“. Práce se zabývá mimořádně aktuální vědeckou tematikou – teoretickým studiem stavebních bloků DNA, basí nukleových kyselin. V naší laboratoři jsem až dosud studovali jen kanonické stavy basí. V předkládané disertaci je naopak důraz kladen na tautomerní formy a jsou studovány nejen izolované báse ale také báse ve vodním prostředí a dokonce páry tautomerních basí.

Klíčovým problémem pro určení pravděpodobnosti existence tautomeru případně jeho komplexů je přesné určení jak energie izolovaného systému, tak i příslušné interakční a solvatační energie. Vzhledem k velikosti studovaných systémů jsou příslušné výpočty na hranici možností současné výpočetní chemie. Závěry disertace podporují a interpretují známé skutečnosti o neexistenci případně existenci určitých tautomerních forem basí v plynném a vodním prostředí. Nově ukazují úlohu mikrohydratace a tudíž enthalpického (a nikoliv entropického) členu. Zcela zásadní je poslední studie, která u páru adenin-thymin předvídá existenci tautomerního páru stabilnějšího než Watsonovo a Crickovo, případně Hoogsteenovo uspořádání. Tento závěr by mohl objasnit úlohu tautomerů při porušení genetické informace.

Disertační práce sestává ze čtyř prací, první tři již byly publikovány v předních evropských a světových chemických časopisech, poslední bude zaslána do tisku v příštích dnech. Soudím, že tyto skutečnosti dokreslují kvalitu předložené disertace.

V Praze 16. srpna 2006

  
Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc, FRSC