

Oponentský posudok na habilitačnú prácu

Masarykova Univerzita

Fakulta:

Prírodovedecká fakulta

Habilitácia v odbore:

Fyzikálna chémia

Žiadateľ:

Mgr. Markéta Munzarová, Dr.rer.nat.

Pracovisko:

Ústav chémie, Prírodovedecká fakulta MU

Habilitačná práca:

“Relationship between Structure and Magnetic Properties in Biomolecular, Inorganic, and Bioinorganic Systems.”

Oponent:

Prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.

Pracovisko:

Katedra anorganickej chémie

Prírodovedecká fakulta UK, 84215 Bratislava

Predloženú habilitačnú prácu tvorí výber 12 autorkiných prác publikovaných v prestížnych zahraničných vedeckých časopisoch a 3 kapitol v monografiách v medzinárodne etablovaných vydavateľstvách Wiley a Elsevier. Tento súbor je predstavený úvodom v rozsahu zhruba 40 strán. Práce sú venované štúdiu vzťahov medzi magnetickými vlastnosťami látok a ich geometrickou štruktúrou metódami kvantovej chémie, ale pozornosť je tiež upriamená na vzťah medzi elektrónovou štruktúrou a symetriou študovaných systémov. Uvedené práce predstavujú 3 základné okruhy problémov: i) štruktúra a magnetizmus v rozsiahlych systémoch (v tuhej fáze); ii) závislosť parametrov NMR nukleových kyselín od geometrie systémov; iii) výpočty parametrov EPR a NMR spektier bioanorganických systémov. Všetky spomenuté oblasti predstavujú vysoko aktuálny základný výskum vo svete. Vo svojom úvode autorka najskôr stručne oboznamuje čitateľa so všetkými uvedenými problematikami, pokračuje popisom použitých metód a úvodnú časť ukončuje najvýznamnejšími závermi uskutočnených štúdií i vo svetle neskoršieho vývoja v daných oblastiach v kontexte svetovej vedy.

V prvej oblasti sa dosiahol pozoruhodný výsledok vysvetľujúci trigonálne planárnu štruktúru AuI_3 v mriežke supravodiča $Bi_2Sr_2CaCu_2O_3$ vďaka prenosu elektrónov zo supravodiča do polo-obsadených hraničných orbitalov AuI_3 . Nemenej zaujímavým je príspevok k objasneniu periodických trendov v stabilite elektrónovo bohatých trojcentrových systémov.

Oblasť výskumu NMR parametrov nukleových kyselín od geometrie systémov bola zameraná najmä na vzťah medzi chemickým posunom na ^{31}P a konformáciou skeletu nukleových kyselín. Poprvýkrát sa takáto štúdia uskutočnila relevantnými kvantovochemickými metódami, pričom sa dosiahol bezprecedentný súhlas s experimentom. Zaujímavým výsledkom je tiež interpretácia nečakanej anti-Karplusovskej závislosti spin-spinovej interakcie v niektorých nukleosidoch.

Výpočty EPR a NMR parametrov bioanorganických molekúl boli zamerané na

preverenie spoľahlivosti rôznych funkcionálov hustoty a rôznych báz v komplexoch vanádu(V). Výsledky boli interpretované s využitím originálnej dekompozície tenzora hyperjemnej interakcie cez príspevky od jednotlivých molekulových orbitalov. Rovnako sa preverovala spoľahlivosť viacerých relativistických prístupov pri výpočtoch chemických posunov na ligandoch v komplexoch platiny a zlata, pričom sa odporúčali „optimálne“ postupy pri takýchto výpočtoch.

Tri spomenuté kapitoly v monografiách predstavujú prehľadné články z oblastí DFT výpočtov parametrov EPR a NMR spektier. Dve rozsiahlejšie sú dielom iba samotnej habilitantky. Samotné pozvanie habilitantky k napísaniu týchto prehľadov je uznaním jej kvalít v medzinárodnom merítku.

Všetky práce habilitantky prešli náročným oponentským konaním v špičkových časopisoch a nie je potrebné ich ďalej komentovať. Prínos samotnej habilitantky do týchto prác je nespochybniteľný. Oceňujem tiež široký záber výskumu, ktorého sa habilitantka počas svojej kariéry dotkla. Dokázala tým svoju rozhladenosť, dobrý teoretický základ, ale tiež ochotu učiť sa, tak prepotrebnú pre vysokoškolského učiteľa.

Vzhľadom k vyššie uvedenému, k samotnej práci nemám otázky, pripajám však námety do prípadnej diskusie:

1. Ako sa habilitantka s odstupom času pozerá na spoľahlivosť DFT výpočtov parametrov EPR a NMR spektier z prepovedného hľadiska? Črtajú sa v tomto smere výpočtovo rovnako efektívne „ab initio“ alternatívy s hierarchickou kontrolou presnosti?
2. Na akej úrovni aproximácie je potrebné zahrnúť relativistické efekty v prípade komplexov s ťažkými atómami?

Záver:

Záverom konštatujem, že predložená práca Mgr. Markéty Munzarovej, Dr.rer.nat. **“Relationship between Structure and Magnetic in Biomolecular, Inorganic, and Bioinorganic Systems.”** nielen splňa, ale výrazne prevyšuje štandard kladený na prácu predloženú k habilitačnému konaniu v odbore „Fyzikálna chémia“. Uchádzačkin vedecký prínos zúročený vo vyše 20 publikáciách vo vysoko-impaktovaných medzinárodných časopisoch, ako i významný ohlas na tieto práce ma oprávňuje plne podporiť jej menovanie za docenta v odbore fyzikálna chémia.

V Bratislave 11. januára 2014.

Prof. RNDr. Jozef Noga, DrSc.