

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Štěpán Jílek
Název práce: Vibrační optická aktivita 3-aminoquinuclidinu
Studijní program a obor: Fyzika / Obecná Fyzika
Rok odevzdání: 2019

Jméno a tituly oponenta: Ing. Jakub Kaminský Ph.D.
Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.
Kontaktní e-mail: kaminsky@uochb.cas.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/opponenta:

Předložená bakalářská práce je zaměřena na studium chiroptických vlastností molekuly 3-aminoquinuclidinu, jež je důležitou součástí řady léků používaných na potlačení vedlejších vlastností chemoterapie při léčbě rakoviny. Metody vibrační spektroskopie (IČ, Raman) jsou

vhodným nástrojem pro správnou identifikaci a charakterizaci této látky. Použití chirálních variant zmíněných metod (ROA, VCD) jejich potenciál ještě zesiluje. Motivace práce, která je zaměřena mimo jiné na vypracování správného postupu k využití těchto experimentálních technik, je tudíž zřejmá.

Práce je zpracována jako tematicky ucelený text shrnující kandidátův samostatný výzkum, je logicky strukturovaná s nadprůměrným rozsahem. Množství výsledků odpovídá alespoň dvouleté samostatné práci. Celkový dojem je nadprůměrný, práce je čtivá, graficky velmi dobře zpracovaná a dojem neruší žádné nepřesnosti, nelogičnosti nebo nejednoznačné definice. Práce je napsána kvalitní češtinou bez zjevných gramatických chyb. Rovněž se práce vyznačuje velkou pečlivostí (zejména při zpracování a vyhodnocování experimentálních spekter), což je již standardem na autorově pracovišti.

Práce je rozdělena standardně do několika oddílů. Teoretická část stručně shrnuje důležitost zkoumané látky a principy použitých experimentálních metod. Rovněž se v krátkosti zaměří na diskuzi o výpočetních metodách, které je běžně nutno použít pro plnou interpretaci experimentálních ROA a VCD spekter. Experimentální část detailně popisuje všechny použité experimentální postupy. Výsledky pak shrnují závěry o rozpustnosti zkoumané látky, vlivu pH na zkoumané spektroskopické vlastnosti, stanovení pK_A . Dále obsahují plnou interpretaci jednotlivých vibračních pásů, analýzu chirálních spekter ROA a VCD. Zajímavá je rovněž část zabývající se porovnáním experimentu v kapalně a pevné fázi, kde měření v pevné fázi vyžadovalo využití netriviálních postupů. Na závěr pak autor provedl i výpočetní studii spektrálních vlastností zkoumané látky pomocí metod kvantové chemie. Mohu tedy říci, že předkladatel si osvojil jak řadu experimentálních technik vibrační spektroskopie, tak teoretické postupy pro jejich vyhodnocení (rovněž nelze zapomínat na kvalitní faktorovou analýzu experimentálních dat). Myslím, že práce je na bakalářskou práci nadprůměrná a závěry v ní uvedené by se měly stát podkladem pro budoucí článek v impaktovaném časopise.

Z důvodu všeho výše řečeného proto práci s radostí doporučuji ji k obhajobě.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

K práci nemám větší výhrady. Snad jen pár doplňujících dotazů, či připomínek, které by měly sloužit spíše pro vylepšení textu než jako jeho kritika.

- 1) Str. 30 – Autor zmiňuje popularitu B3LYP funkcionálu, což dokládá odkazem na souhrnnou publikaci Čárského a Urbana. Reference je možná poněkud nešťastně umístěna u slova B3LYP, takže to vypadá jako odkaz na původní práci o B3LYP (Becke et al.). Asi bych v daném odstavci zmínil jak odkaz na původní práci Beckeho, tak odkaz dokládající popularitu zmíněného funkcionálu.
- 2) V textu je často použita česká varianta zkoumané látky, kdežto v názvu práce se vyskytuje anglická verze. Asi bych to v celém textu sjednotil.
- 3) Jaká CaF_2 „skla“ autor použil při měření VCD spekter? Cylindrická nebo hexagonální? Se spacerem nebo broušená?
- 4) Str. 50, Obrázek 15 – čím je způsoben nárůst intenzity pásů 14 a 15 v DMSO? Jedná se o artefakt?
- 5) U měření VCD v pevné fázi, bylo se vzorkem rotováno pro potlačení artefaktů?
- 6) Str. 77, Obrázek 31 – Nešlo by provést i nějaké číselné porovnání teoretických ROA s experimentem? Třeba ve formě Δ odchylky jednotlivých spekter? Alespoň v oblasti do 1600 cm^{-1} , kde je vliv anharmonicity menší a teoretické pásy lépe sedí na experiment. V tomto kontextu bych se rád zeptal, zda při výpočtu vibračních frekvencí byly výsledné frekvence nějak škálovány. Obecně myslím, že detaily o výpočtech mohly být souhrnně uvedeny v sekci Metody.

- 7) Trochu v závěrečné části postrádám detaily o použité molekulové dynamice. Autor zmiňuje, že MD simulaci neprováděl sám, nicméně pár detailů by čtenář jistě ocenil. Zajímalo by mne rovněž například, zda MD simulace dávají podobné střední hodnoty úhlu ξ jako autor pozoroval pomocí DFT skenu.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

V Praze, 5.6.2019

