

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Bc. Tomáš Šikorský

Název práce: Studium chirálních vlastností supramolekulárních komplexů

Studijní program a obor: Fyzika, obor Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly školitele: doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.

Pracoviště: KMF

Kontaktní e-mail: Lenka.Hanykova@mff.cuni.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 školitele:

Diplomová práce je zaměřena na problematiku porfyrinů, konkrétně tvorbu komplexu mezi derivátem porfyrinu di-brombenzene-3,5-di-tert-butyl-4-oxo-2,5-cyclohexadienylidene porphyrinogenu (DiBrBzOxP) a nízkomolekulárním hostem Ibuprofenem. Studovaný systém je mimo jiné zajímavý tím, že chiralitu Ibuprofenu je možné detekovat pomocí NMR pásů achirálního DiBrBzOxP a z rozštěpení signálu pyrrolových protonů určit enantiomerní přebytek.

Pro úspěšné splnění cílů diplomové práce musel posluchač získat znalosti z oblasti NMR spektroskopie a kvantové chemie a prostudovat odbornou literaturu týkající se problematiky chiralit molekul. Teoretická část práce obsahuje přehledné shrnutí takto získaných vědomostí. Experimentální část pak zahrnuje popis dosažených experimentálních výsledků, jejich zpracování a interpretaci. Následuje kapitola věnující se použitým metodám pro kvantové výpočty a především pak přehledu teoretických výpočtů a srovnání těchto výstupů s experimentem. Závěr práce obsahuje kromě shrnutí také kritické zhodnocení některých problémů, které se objevily během řešení práce, a návrh pro jejich řešení a další postup v tomto výzkumu.

Posluchač změřil sadu NMR spekter pro různé hodnoty enantiomerního přebytku Ibuprofenu a pomocí fitace spektrálních čar stanovil vliv chiralit hosta na posuny čar molekuly DiBrBzOxP. Z titračních experimentů pak byla získána rovnovážná asociační konstanta komplexu a zároveň byl posouzen a diskutován vliv vody na její hodnotu a tím i na tvorbu samotného komplexu. Posluchač také zkoumal protonaci molekuly DiBrBzOxP užitím optické spektroskopie a zjistil, že během titrace kyselinou dochází k tvorbě různě protonovaných forem DiBrBzOxP. Mezi nejcennější výstupy považuji stanovení konformačních forem komplexu DiBrBzOxP/Ibuprofen pomocí kvantově chemických výpočtů a velmi uspokojuvou korelaci s experimentálními výsledky dosaženými NMR spektroskopii. Pro podporu teoretických výpočtů diplomant uvážlivě diskutuje experimentální data (např. vliv chemické výměny, termodynamické parametry komplexu) a získává tak představu o mechanismu přenosu chiralit.

Z výše uvedeného odstavce je patrné, že diplomant během řešení své práce vyprodukoval velký objem výsledků. Výsledková část diplomové práce je však v některých pasážích strohá a posluchač tak poněkud „skrývá“ úsilí, které bylo nutno k tomuto vynaložit. Tato nedokonalost však byla významně převážena přístupem Tomáše Šikorského k zadanému úkolu. Diplomant iniciativně hledal způsoby pro řešení vzniklých problémů a samostatně navrhoval kroky pro další práci. Během celé doby projevoval vysoký zájem o studovanou problematiku a po teoretické stránce se dokázal velmi pečlivě připravit. Domnívám se, že posluchač prokázal přesvědčivě nadání pro tvůrčí samostatnou experimentální práci a znalosti na úrovni absolventa MFF UK. Diplomová práce je základem připravované publikace pro odborný časopis.

Doporučuji uznat práci Tomáše Šikorského jako diplomovou a navrhuji ji ohodnotit stupněm výborně.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

V Praze, 25.5.2011

Místo, datum a podpis školitele:

doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.