

## Oponentský posudek diplomové práce Jiřího Kesslera

### „VÝVOJ A APLIKACE MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKY PRO CHIRÁLNÍ SYSTÉMY“

Předložena diplomová práce je přehlednou a systematickou teoretickou studií chování roztoků chirálních látek v chirálním rozpouštědle. Autor studoval NMR vlastnosti různých kombinací absolutních konfigurací rozpuštěné látky a rozpouštědla. Tyto systémy vykazaly rozdíly v radiálních distribučních funkcích a zastoupení konformerů. Zjištěné rozdíly korespondují s experimentálními hodnotami NMR posunů. Dale práce představuje novou metodu selektivního výběru klastrů, jež umožňuje výběr menšího reprezentativního vzorku.

Téma práce, tedy studium chirálních látek a jejich směsí, je aktuální a náročné. Použité metody jsou adekvátní cílům práce. Práce je přehledně sepsaná, nicméně teoretická část mohla být méně obsáhlá a více zaměřená na cíle diplomové práce.

K diskusi předkládám tyto dotazy:

1. Tabulka 4.3 uvádí spočtené zprůměrované rozdíly NMR posunů. Jak velké byly rozptyly spočtených NMR hodnot?
2. Byly by možné a výhodné využít pro výběr klastrů použít také nějaké energetické kritérium, např. DFT-D energie optimalovaných klastrů?

Závěrem mohu konstatovat, že posuzovaná práce Jiřího Kesslera představuje přínos ke studovanému tématu a splňuje požadavky kladené na diplomovou práci. Navrhuji proto, aby práce byla přijata k obhajobě.

RNDr. Jindřich Fanfrlík, Ph.D.

ÚOCHB v.v.i., AV ČR

16.5.2012