

UNIVERZITA KARLOVA v PRAZE  
Přírodovědecká fakulta  
Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Posudek školitele na diplomovou práci:

Jiří Kessler: VÝVOJ A APLIKACE MOLEKULÁRNÍ DYNAMIKY PRO CHIRÁLNÍ SYSTÉMY

Diplomant se ve své práci věnoval náročnému úkolu, reprodukci malých rozdílů pozorovaných v NMR spektrech pro různé chirální směsi, např. mezi R-látkou v R-rozpouštědle a S-látkou v R-rozpouštědle, apod. Detekce chiralilty pomocí NMR je dosud poměrně neprozkoumaná oblast, a proto může mít tento výzkum velký význam pro budoucí vývoj molekulární spektroskopie.

Provedené molekulové simulace skutečně odhalily rozdíly ve fyzikálních vlastnostech (konformačních energií a radiální distribuční funkci) těchto směsí, které korelovaly s NMR posuny. Přímé středování MD klastrů sice ke kvantitativní shodě nevedlo, nicméně jako cenný vedlejší produkt bylo optimalizováno hromadné zpracovávání mnoha tisíc MD geometrií, a byla vyvinuta efektivní metoda preselektce klusterů, která umožňuje výrazně šetřit výpočetní čas v podobných simulacích.

Předpokládáme, že výsledky v brzké době dopracujeme do nejméně dvou publikačních výstupů ve špičkových časopisech.

Práce je psaná přehledně a s malým množstvím překlepů. Trochu rušivě působí přílišné teoretické detaily s nejasným vztahem k podstatě práce, a naopak vlastní výsledky by mohly být hlouběji uvedeny a komentovány.

Celkově se jedná o práci velmi kvalitní s originálními výsledky, a proto ji doporučuji k obhajobě.

S pozdravem,



Praha, 14.5.2012

Doc. RNDr. Petr Bouř, DSc.

Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Academy of Sciences  
Flemingovo nám. 2, 16610 Prague 6, Czech Republic

Tel: (420)-220-183-348, bour@uochb.cas.cz