

Posudek diplomové práce Ladislava Bendy Bc.

Výpočetní studium struktury a vlastností klastrů ethanolu

Diplomová práce Ladislava Bendy se zabývá studiem vlastností klastrů ethanolu a jejich detekcí pomocí nukleární magnetické rezonance (NMR). Studium klastrů molekul vázaných vodíkovými vazbami představuje z hlediska všech důležitých biochemických reakcí zásadní problematiku. Variabilita strukturních motivů a jejich zastoupení v reálném prostředí, fyzikálně-chemické vlastnosti a doba života těchto nekovalentně vázaných klastrů v závislosti na okolních podmínkách jsou klíčové parametry, které mohou zásadním způsobem ovlivňovat průběh důležitých biochemických procesů. Diplomová práce má část výpočetní i experimentální. Autor studoval vlastnosti klastrů molekul ethanolu na konkrétních modelových systémech – lineárních a cyklických klastrech pomocí výpočetních metod kvantové chemie. Teplotní závislost naměřených spektroskopických parametrů NMR pro různé koncentrace ethanolu ve směsi ethanol-hexan tvoří experimentální část diplomové práce.

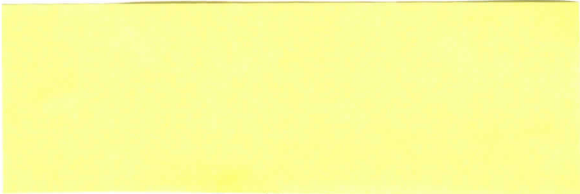
Práce je vhodně členěná do jednotlivých kapitol a díky přehlednému popisu teorie experimentální techniky NMR a prezentaci vlastních naměřených dat bude vhodným studijním materiálem pro uvedení do zmíněné problematiky. Výčet standardních *ab initio* metod podaný v Kapitole 2 a popis jejich použití pro výpočty vlastností klastrů uvedený v Kapitole 3 je doplněný popisem metody NMR v Kapitole 4. Popis teoretických metod v této úvodní části je dostatečný pro interpretaci naměřených NMR parametrů uvedených v Kapitole 7. Vzhledem k rozsahu práce, celkový počet stran je sto, by možná bylo vhodné vypustit nebo zkrátit některé Kapitoly, např. 2.2, 2.3, 2.4.4, které se zabývají popisem obecně známých postupů či metod a zároveň nemají přímý vztah ke studované problematice. Vlastnosti modelového systému jsou popsány v Kapitole 5 včetně rešeršní části, která shrnuje důležité závěry čtyř prací publikovaných během posledních šesti let. Vhodnější způsob citování literatury v textu by podle mého názoru byl standardní způsob, t.j. kdy pořadí v seznamu literatury odpovídá pořadí první zmínky jednotlivých položek v textu. Relativně rozsáhlá Kapitola 6 je věnována výsledkům výpočetní části, které jsou v Kapitole 8 porovnány s naměřenými NMR parametry.

Za důležitý výsledek této diplomové práce považuji její komplexnost, konkrétně způsob řešení problematiky nekovalentně vázaných klastrů pomocí teoretického modelování termodynamických parametrů klastrů, spektroskopických parametrů NMR a jejich porovnání s vlastním experimentem. Teoretická predikce a měření spektroskopických parametrů představuje možný způsob detekce klastrů v roztoku. Jedná se zároveň o velice obtížný úkol, který v současné době není dosud uspokojivě vyřešen. Tato skutečnost plyne jak ze závěrů publikovaných v literatuře, tak i z výsledků předložené diplomové práce. Jednoznačný závěr o velikosti a druhu klastrů ethanolu a jejich zastoupení ve směsi ethanol – hexan na základě výsledků předkládané diplomové práce nelze učinit, jak bylo konstatováno v Kapitole 8.3.

Provedené výpočty a naměřená data nicméně umožňují velice obecný a zároveň užitečný odhad použitelnosti NMR spektroskopie pro detekci nekovalentně vázaných klastrů, což představuje cenný materiál pro jejich další studium. Diplomant prokázal výborné znalosti teoretických výpočetních metod a zároveň schopnost jejich použití v praxi, dokázal korelovat vypočtené parametry NMR spekter s vlastními naměřenými daty a na základě této korelace vyvodit správné závěry pro studovanou problematiku.

Diplomovou práci Ladislava Bendy Bc. z výše zmíněných důvodů jednoznačně doporučuji k obhajobě.

V Praze 5.5. 2006



Dr. Vladimír Sychrovský

Ústav organické chemie a biochemie AV ČR
Flemigovo nám. 2, 166 10 Praha 6