

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Bc. Václav Březina

Název práce: Spektroskopické a teoretické studium supramolekulárních komplexů symetrických porfyrinů s chirálními guestsy

Studijní program a obor: Fyzika, obor Fyzika kondenzovaných soustav a materiálů

Rok odevzdání: 2014

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 nízkomolekulární chirální kyselinou kafrsulfonovou. Studovaný systém je mimo jiné zajímavý tím, že chiralitu kyseliny je možné detekovat pomocí NMR pásů achirálního DiBrBzOxP.

Pro úspěšné splnění cílů diplomové práce musel posluchač získat znalosti z oblasti NMR spektroskopie a kvantové chemie a prostudovat odbornou literaturu týkající se problematiky supramolekulárních komplexů, porfyrinů a chiralit molekul. Teoretická část práce obsahuje přehledné shrnutí takto získaných vědomostí. Experimentální část pak zahrnuje popis titračních experimentů a jejich zpracování, které vedlo k určení asociační konstanty komplexu. Měření spekter pro různé směsi enantiomerů ukázalo, že štěpení určitých signálů porfyrinu lineárně závisí na enantiomerním přebytku. Byly také provedeny teplotně variabilní experimenty a z nich vyplynulo, že porfyrin se vyskytuje ve více protonovaných konformacích. Jejich existence byla potvrzena teoretickými kvantově chemickými výpočty, které diplomant provedl a jsou popsány v poslední části kapitoly Výsledky. Závěrem jsou přehledně shrnuty výsledky diplomové práce.

Posluchač provedl sadu titračních experimentů, které jsou velmi citlivé na přípravu vzorků a nastavení spektrometru, a proto byly tyto experimenty opakovány vícekrát a z tohoto pohledu byly časově nejnáročnější. Pro správnou interpretaci získaných výsledků musel posluchač provést pečlivou fitaci spektrálních čar a zohlednit vlivy dalších efektů, např. chemické výměny. Metody NMR spektroskopie byly pak uspokojujivě korelovány s provedenými kvantově chemickými výpočty. Posluchač tak použil širokou škálu metodik používaných při studiu supramolekulárních komplexů. Velmi oceňuji snahu o hluboké pochopení a vysvětlení jevů doprovázejících tvorbu komplexu jako jsou procesy chemické výměny a protonace porfyrinu.

Václav Březina přistupoval k zadané diplomové práci zodpovědně. Během jejího řešení 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 bude základem připravované publikace pro odborný časopis.

Doporučuji uznat práci Václava Březiny 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, 19.5.2014

Místo, datum a podpis školitele:

doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.