

Oponent: Ing. Jiří Brus, Dr.

Jméno a příjmení uchazeče: RNDr. Martin Dračínský, Ph.D.

Habilitační práce:

Vývoj experimentálních a teoretických metod NMR spektroskopie pro studium struktury a dynamiky molekul

Posudek oponenta:

Předložená habilitační práce, která je souborem 14 vědeckých publikací publikovaných v letech 2009-2016 v prestižních vědeckých časopisech, velmi ilustrativně charakterizuje soustavný výzkum dr. Martina Dračínského v oblasti NMR spektroskopie pevného stavu, převážně krystalických organických systémů. Z předloženého souboru prací je zřejmé, že se autor systematicky věnuje problematice určování struktury krystalických látek s využitím NMR parametrů, přičemž velký důraz klade na posouzení vlivu dynamiky molekulárních segmentů na shodu NMR parametrů získaných experimentálně a kvantově-chemickými výpočty. V této souvislosti autor detailně prozkoumal vliv vibrací a prokázal, že i relativně malé (nízko-amplitudové) pohyby tyto parametry významně ovlivňují a je nutné vliv těchto pohybů implementovat do standardních kvantově chemických výpočtů.

Všechny vědecké publikace zahrnuté do tohoto souboru jsou jednoznačně původní, jsou velmi profesionální a vědecky hodnotné, přičemž některé z nich např. „*Computational analysis of solvent effects in NMR spectroscopy*“, *J. Chem. Theory Comput.* **2010**, přinášejí zcela zásadní poznatky potřebné pro další rozvoj experimentálně-výpočetních metod NMR spektroskopie pevného stavu. Je též nutno zdůraznit, že vzhledem k neustálému pokroku při vývoji nových komplexních materiálů, léčiv a jejich lékových forem je rozvoj této strukturně-analytické metody velmi aktuální a to nejen z pohledu akademického bádání, ale i efektivní strukturní analýzy průmyslově generovaných produktů. Kombinace kvantově-chemických výpočtů NMR parametrů s rentgenografickými údaji a experimentálními NMR daty je v současnosti velmi progresivní směr NMR krystalografie, který umožňuje získat upřesněné strukturní údaje i o systémech, pro které jsou úplná strukturní data jiným způsobem nedostupná. Další metodický rozvoj v této oblasti je tak velmi potřebný a předpokládám jeho aktuální využití při vývoji nových komplexních funkčních materiálů.

Předložená habilitační práce je po formální stránce zpracována jako soubor vědeckých prací s krátkým úvodním komentářem. V tomto komentáři autor nejprve provede čtenáře základy NMR spektroskopie a podstatou kvantově-chemických výpočtů. V následující sekci jsou pak velmi čtivým a svižným způsobem shrnuty a komentovány nejpodstatnější výsledky autorovy vědecké práce. Závěrečné shrnutí je pak uvedeno ve velmi kompaktní až strohé formě na straně 21. V této souvislosti si dovolím drobnou kritiku. Domnívám se, že autor je natolik fundovaný badatel, že by mohl ve své habilitační práci nastínit v několika odstavcích perspektivy NMR krystalografie, naznačit směr jejího rozvoje a též i limity jejího potenciálního využití. To by této práci zcela jistě slušelo.

Celkově však hodnotím předloženou práci jednoznačně velmi pozitivně a považuji ji za původní a vědecky velmi hodnotnou. Navíc je dr. Martin Dračínský autorem více jak 140 vědeckých prací s nezanedbatelným citačním ohlasem, což dle mého soudu jen podtrhuje jeho vědeckou erudici. Proto **doporučuji přijmout předloženou práci k habilitačnímu řízení před komisí.**

V Praze dne 17.07.2017

Ing. Jiří Brus , Dr.