



V Praze dne 4. června 2021

Posudek oponenta disertační práce „*Theory and Applications of Optical Activity of Biomolecules*“, kterou předložila Mgr. Monika Krupová

Předložená disertační práce je věnována aplikaci chiroptických metod ve třech oblastech, konkrétně ke studiu tzv. amyloidních vláken, nukleosidů v tuhé fázi a magnetickému cirkulárnímu dichroismu vybraných lanthanoidů. Všechna tato témata jsou vysoce aktuální, ať již z pohledu chybějící potřebné včasné diagnostiky závažných neurodegenerativních onemocnění, nebo základního výzkumu v oblasti měření spekter cirkulárního dichroismu v pevné fázi a při působení vnějšího magnetického pole.

Důsledná interpretace spekter cirkulárního dichroismu vyžaduje zvládnutí a užití kvantově-chemických výpočtů. A takto jsou výsledky v předložené disertační práci prezentovány. Aktuálnost zjištěných poznatků dokládají dvě původní vědecké práce a jedno review publikované v kvalitních vědeckých časopisech, kdy z prvoautorství Mgr. Moniky Krupové ve všech třech případech naznačuje, že její příspěvek k jejich vzniku byl zásadní. V závěru práce autorka korektně definuje vlastní podíl práce na každé z nich včetně dvou dalších prací, které jsou připravovány.

Práce je kvalitně zpracována, je psaná anglicky a opírá se o 364 citací. Je členěná dle zvyklostí, kdy každé experimentální části předchází zevrubné shrnutí teoretických poznatků a výsledků prací jiných autorů.

Zcela souhlasím se zásadním dosaženými poznatky, které disertantka uvádí na závěr své práce. Zřetelně ukazují přínos práce k rozvoji metod cirkulárního dichroismu a specificky k jeho využití v oblasti sledování konformace supramolekulárních struktur a volbu experimentálních podmínek pro měření uspořádání látek v krystalické fázi.

Konstatuji, že jsem tuto disertační práci prostudoval a dle mého názoru autorka zcela nepochybně prokázala schopnost a připravenost k samostatné tvořivé činnosti v příslušném oboru chemie, jak požaduje §47, odst. 4, Zákona č. 111/1998 Sb., a je připravena na samostatnou práci v oblasti výzkumu nebo vývoje. Práci proto **doporučuji k obhajobě**.

V diskuzi bych se rád zeptal na fakt, že práce zahrnuje jak poměrně rozsáhlé experimentování v laboratoři při přípravě a měření spekter, tak i u počítače při zpracování výsledků a jejich interpretaci pomocí simulací. Zeptal bych se disertantky, která část jí zabrala více času, neboť obě samy o sobě považují za docela časově i intelektuálně náročné.

doc. Ing. Kamil Záruba, Ph.D.