

Posudek oponenta dizertační práce Mgr. Moniky Krupové

Theory and Application of Optical activity of Biomolecules

Předložená dizertační práce o rozsahu 134 stran s pěti přílohami sepsaná v anglickém jazyce se zabývá aplikacemi tří metod chiroptické spektroskopie při studiu chirálních molekul, a to vibračního cirkulárního dichroismu (VCD), Cirkulárně polarizované luminescence (CPL) a magnetického cirkulárního dichroismu (MCD).

Pokud jde o zvolené téma dizertace, jde o téma nesporně aktuální, v řadě ohledů průkopnické a proto také mimořádně náročné.

Práce má klasické členění na úvod, stručné shrnutí současného stavu problematiky, formulaci cílů práce, experimentální část, výsledky a diskusi a závěr. Výsledková část je doplněna pěti příloženými publikacemi, z nichž tři již byly publikovány v impaktovaných časopisech *ChemPlusChem* (IF 2,753), *ACS Omega* (IF 2,87) a *ChemPhysChem* (IF 3,144) a dvě jsou rukopisy připravené k odeslání. U všech uchazečka uvádí svůj podíl a na všech je uvedena jako první autor.

Práce má vynikající grafickou i jazykovou úroveň, je přehledná a čtivá. Velmi se mi líbila úvodní kapitola Introduction to Chiroptical spectroscopy, která je přehledná a velmi edukativní s řadou názorných obrázků. Mimořádně rozsáhlý je i seznam použité literatury čítající neuvěřitelných 364 odkazů.

Výsledková část je rozdělena do tří kapitol zaměřených na tři různé oblasti využití metod chiroptické spektroskopie, a to Chiroptical Spectroscopy of Amyloid Fibrils, Vibrational Circular dichroism of Nucleoside Crystals a Magnetic Circular Dichroism of Ln^{3+} Ions. Každá z těchto kapitol má svoje členění na přípravu vzorků, popis použitých experimentálních metod, modelových výpočtů, výsledky a diskusi. Mně osobně nejvíc zaujaly výsledky studia amyloidních fibril a jejich polymorfů a solid state VCD nukleosidových krystalů.

Uchazečka nepochybně prokázala při řešení své dizertační práce mimořádnou experimentální zručnost a vědeckou invenci i erudici. Prokázala, že chiroptické spektroskopické metod představují velmi užitečný nástroj pro studium chirálních molekul a supramolekulárních agregátů a znovu potvrdila, že kombinace experimentálních a teoretických

přístupů k interpretaci spekter vede k hlubšímu vhledu do struktury a mezimolekulárních interakcí studovaných objektů.

Předložená dizertační práce podle mého názoru jednoznačně prokazuje, že si uchazečka osvojila metody vědecké práce a je způsobilá k samostatné tvůrčí vědecké činnosti. Předkládaná práce Mgr. Moniky Krupové splňuje všechny požadavky kladené na dizertační práci. Doporučuji ji proto k obhajobě.

V Praze dne 21. června 2021

Prof. RNDr. Vladimír Baumruk, DrSc.