

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autorka: Anna Rosenkrancová

Název práce: Charakterizace nových kontrastních látek na bázi Gd-DOTA pro zobrazování pomocí nukleární magnetické rezonance (MRI)

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2021

Jméno a tituly oponenta: Doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.

Pracoviště: KMF MFF UK

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 oponenta:

Bakalářská práce se zabývá charakterizací makrocyclických molekul metodami NMR spektroskopie. Charakterizace pokrývá poměrně široké spektrum experimentálně a interpretačně složitých metod NMR spektroskopie od měření 1D spekter přes heteronukleární 2D korelační spektra, relaxační experimenty až po zobrazovací MRI experimenty.

Teoretická část práce obsahuje úvod do problematiky NMR spektroskopie a popisuje používané experimentální techniky. Je zde obsažen stručný souhrn odborné literatury na téma studovaných makrocyclických molekul a jejich komplexů s gadoliniem, které se používají jako kontrastní látky pro MRI zobrazování.

Experimentální část je rozdělena dle používaných NMR sekvencí. Pro přiřazení signálů jsou použity pokročilé metody heteronukleární 2D spektroskopie pro jednodušší molekulu cyklodextrinu a poté složitější modifikovanou molekulu DOTA. Zajímavé výsledky byly dosaženy z teplotně proměnných experimentů, kde se projevuje jev chemické výměny mezi různými izomery studované molekuly. Stěžejní výsledky práce pak představuje studie molekulární dynamiky pomocí několika relaxačních experimentů NMR. Na základě jednoduchého dynamického modelu jsou spočítány a diskutovány korelační časy příslušné různě pohyblivým částem molekuly. Posledním experimentem je pak ukázka zobrazovací metody MRI jako demonstrace použití studované molekuly pro kontrastní látky. Vyjmenované použité techniky patří ke složitějším a autorka v práci dokázala srozumitelně vysvětlit jejich nastavení a provedení. S obtížností použitých technik pak souvisí nesnadná interpretace získaných výsledků, ale i s tím si posluchačka poradila výborně. Souhrnem bych chtěla ocenit komplexnost bakalářské práce a úroveň zpracování výsledků. Také vnímám obtíže současné doby, kdy jistě nebylo lehké v omezených podmínkách zvládnout tolik různých experimentů.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Komentáře:

Počet tiskopisných chyb a překlepů není četný, ale nelze je zanedbat. Pro tvorbu dalších studentských prací doporučuji pečlivější kontrolu textu.

Otázky:

1. V rovnici 3.1 je zavedena konstanta A, která není vysvětlena. Jaký je její význam?
2. V kapitole 6.2.1 je diskutován jev tzv. chemické výměny. V teoretické části práce není tento jev popsán, proto by bylo vhodné v rámci diskuze tento jev vysvětlit a popsat vliv chemické výměny na NMR spektrum.
3. V kapitole 6.2.3 je zmíněna významná nepřesnost při detekci jevu NOE. Co je zdrojem této experimentální chyby?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

Praha, 24.8.2021

Doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.