

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- | | |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input type="checkbox"/> bakalářské práce | <input checked="" type="checkbox"/> diplomové práce |

Autor/ka: Mária Šoltésová

Název práce: Experimental Investigation of Selected Supramolecular Systems by NMR Spectroscopy

Studijní program a obor: Fyzika, : biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2009

Jméno a tituly vedoucího: RNDr. Jan Lang, Ph.D.

Pracoviště: KFNT

Kontaktní e-mail: Jan.Lang@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 slečny Šoltésově se zabývá studiem dvou supramolekulárních systémů pomocí metod NMR spektroskopie a hydrodynamických výpočtů. Hlavní téma práce tvoří studium molekulárních klastrů ethanolu v nepolárním rozpouštědle. Téma práce bylo později rozšířeno, aby bylo možné do diplomové práce zahrnout i výsledky týkající se dynamiky inkluzního komplexu kryptofan C – chloroform, které kandidátka získala za dobu svého semestrálního pobytu na Stockholmské univerzitě (Prof. J. Kowalewski).

Hlavními výsledky části práce týkající se inkluzního komplexu kryptofanu-C je zjištění vysoké pohybové vazby mezi molekulami hostitele a hosta. Vedle toho byla stanovena kinetika tvorby a rozpadu komplexu a jeho konstanta stability.

V případě problematiky klastrů ethanolu spatřuji největší přínos ve vypracování zcela nové metodiky stanovení velikosti klastrů založené jednak na měření difúzního koeficientu ethanolu a porovnání experimentální hodnoty a výsledkem hydrodynamického výpočtu. Celý několikastupňový protokol zahrnoval vedle zmíněného měření i rozsáhlá kalibrační a referenční měření. Program HydroNMR, který byl použit pro hydrodynamické výpočty byl autory zamýšlen pro výpočet difúzních koeficientů středně velkých proteinů. Pro malé molekuly bylo nutné změnit jeho nastavení provést rozsáhlé testování spolehlivosti výsledků.

Výsledkem celé procedury je stanovení průměrné velikosti klastrů ethanolu ve dvou vzorcích roztoku ethanolu v hexanu. Důkazem správnosti vyvinuté metodiky je vynikající souhlas mezi vypočítaným a experimentálně zjištěným difúzním koeficientem resp. hydrodynamickým poloměrem monomérního ethanolu při teplotách nad 308 K.

Kandidátka tak v práci zvládla jak celou řadu homo- a heteronukleárních technik NMR, včetně měření relaxací a translační difúze, jejich rigorózní vyhodnocení a hydrodynamické výpočty. Velmi vysoce oceňuji úroveň zvládnutí experimentálních i teoretických technik, vytrvalost a pečlivost kandidátky při hledání nejlepšího experimentálního a zpracovávacího protokolu a schopnost práci dokončit ve všech relevantních detailech.

Výsledky práce byly dosud publikovány jako konferenční příspěvky, a to jako přednáška na 24th Central European NMR Meeting ve Valticích (M. Šoltésová, L. Benda, J. Czernek, J. Lang: Size of Ethanol Molecular Clusters from Diffusion Measurements and Calculations, sborník str. C-36, Masaryk University, Brno, 2009) a jako poster na EUROMAR 2009 ve Göteborgu ve Švédsku (Z. Takacs, M. Šoltésová, T. Brotin, J.-P. Dutasta, J. Kowalewski: Inclusion complexes of a cryptophane-A derivative and cryptophane-C with ¹³CHCl₃: An NMR study of exchange kinetics and relaxation, sborník str. 92). Získané výsledky jsou podkladem dvou rozpracovaných příspěvků do mezinárodních odborných časopisů.

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

V Praze, 4.9.2009

Místo, datum a podpis školitele:

