

Universita Karlova, Praha
Matematicko-fyzikální fakulta

Posudek školitele

Diplomová práce: Bc. Jakub Jungwirth: Application of chiroptical techniques for exploration of inhomogeneous systems

Školitel: Prof. RNDr. Petr Bouř, DSc.

Ve své práci se Jakub Jungwirth zabývá aplikací spektroskopie Ramanovy optické aktivity na dva obtížné případy, molekulu dipeptidu Ala-Ala a proteinových fibril. Práce je tak zaměřena na zvětšení okruhu aplikací této poměrně nové a rychle se rozvíjející spektroskopie pro studie zaměřené na strukturu a vlastnosti biologicky-relevantních systémů.

Během vypracování práce Jakub se velice rychle a tvořivě seznámil s experimentálními i teoretickými taji vibrační optické aktivity, což se také odráží v úvodních částech. Část práce o Ala-Ala je v současné době připravována k publikaci v J. Chem. Theory Comput. Obtížnost problému spočívala v získání kvalitních experimentálních dat a zejména v rozsáhlých výpočtech kombinujících molekulovou i kvantovou mechaniku nutných k interpretaci spekter. Díky pečlivosti a úsilí autora se podařilo nebyvale přesně nasimulovat spektrální tvary a tak získat i kvantitativní informaci o rozložení konformerů ve vzorku.

Měření fibril pomocí této techniky se nepovedlo úplně vyřešit, nicméně bylo dosaženo podstatného pokroku. Autor práce velice dobře zmapoval problematiku, od reprodukovatelnosti přípravy vzorků přes adaptace vzorkového prostoru a optických částí spektrometru. Za velice cenné pro budoucí experimenty považují charakteristiku chování rotační cely a pokusy s mnoha polarizačními módy.

Práce je psána kvalitní a oduševnělou angličtinou téměř bez překlepů, s velice dobrou grafickou úpravou.

Předložená diplomová práce tak více než splňuje formální požadavky, doporučuji ji tedy k obhajobě a navrhuji klasifikovat stupněm výborně.



Praha, 4. 6. 2017

Petr Bouř

Ústav organické chemie a biochemie,
Akademie věd České republiky,
Flemingovo nám. 2, 16610 Praha 6