

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

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

Autor/ka: Lenka Minářová
Název práce: Experimentální studium vodíkových vazeb
Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika
Rok odevzdání: 2007

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Lenka Hanyková, Dr.
Pracoviště: KMF
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:

Diplomová práce Lenky Minářové se zabývá studiem dynamiky a vodíkových vazeb v kalix[n]arenech pomocí spektroskopie nukleární magnetické rezonance (NMR). Oligomerní molekuly kalix[n]arenů se vyskytují v různých prostorových konformacích, jejichž tvorba závisí na tom, jak je základní molekula substituována. V práci zkoumaný 25,26-dipropoxy-5,11,17,23-tetra-butylkalix[4]aren má ve své struktuře zabudované hydroxylové skupiny vytvářející pole vodíkových můstků se stabilizačními účinky. Relaxační experimenty NMR umožnily studovat koordinované překlápění těchto vodíkových vazeb a zároveň s použitím vhodného modelu pro dynamické chování charakterizovat globální a lokální pohyblivost molekuly.

Práce je přehledně rozčleněna do úvodu, teoretického přehledu, experimentální části, popisu dosažených výsledků včetně jejich diskuse, závěru a souhrnu použité literatury. Metodicky a informačně přínosné se jeví stanovení parametrů Lipari-Szabóova modelu včetně aktivační energie a určení příspěvku chemické výměny. Zvláštní problém v souvislosti s vlivem chemické výměny na příčné relaxační časy je odhad korelačních časů tohoto procesu. Získané výsledky jsou podloženy velkým množstvím experimentálních dat, jejichž získání vyžadovalo zvládnutí různých NMR sekvencí na vysoké úrovni. Posluchačka dokázala také zpracovat data mnohonásobným fitováním, kdy výsledky jednoho kroku byly použity pro další výpočet.

K práci mám následující připomínky a otázky:

1. V tabulkách 1 a 10 chybí jednotky pro veličiny $t_{\text{mix,max}}$ resp. chyba τ_M .
2. Tabulka 13 uvádí relaxační rychlosti s přesností na tisíce, přitom chyba je zaokrouhlena jen na setiny.
3. Některé obrázky a tabulky mají příliš stručné popisky, pro čtenáře je jednodušší v popisku zjistit, při jaké teplotě bylo zobrazené spektrum měřeno apod. Více informativní popisky odpovídají i standardu používaném v odborné literatuře.
4. Lokální korelační časy (Tabulka 12) byly určeny s poměrně velkou chybou ve srovnání s ostatními parametry Lipari-Szabóova modelu. Čím je to způsobeno?
5. Srovnání geometrie vodíkových vazeb pro různě substituované kalix[n]areny v kapitole 12.1 ukazuje, že v diplomové práci studovaná molekula má přibližně stejně silné vodíkové vazby mezi hydroxylovými skupinami jako základní kalix[n]aren a thiakalix[n]aren, přesto chemický posun odpovídajícího OH signálu je asi o 1 ppm menší. Lze to vysvětlit?

Je zřejmé, že uvedené připomínky jsou nepodstatného charakteru a závěrem tedy mohu konstatovat, že prezentované výsledky dávají přímou odpověď na konkrétní otázky týkající se dynamického chování studované molekuly, z dosažených výsledků jsou vyvozovány věrohodné závěry. Doporučuji proto diplomovou práci k obhajobě a navrhuji ji ohodnotit práci známkou výborně.

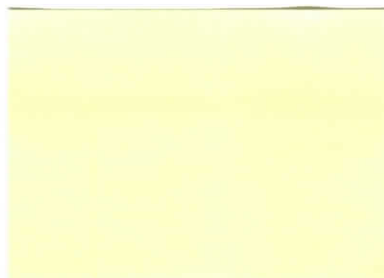
Práci

doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Na Albeři, 4. 9. 2007



RNDr. Lenka Hanyková, Dr.