

# 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: Lenka Minářová

Název práce: Experimentální studium vodíkových vazeb

Studijní program a obor: Fyzika, Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2007

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 vedoucího:**

Diplomová práce slečny Lenky Minářové se zabývá měřením teplotní závislosti rychlosti překlápění řetízku dvou vodíkových vazeb v proximálně disubstituovaném kalix[4]arenu. Základní metodikou byla spektroskopie NMR a to zejména sekvence spinového echa a další metody pro měření relaxací jaderného spinu. Nutným mezikrokem bylo vyhodnocení rotační difúze a pikosekundových vnitřních pohybů v molekule.

Kandidátka zvládla komplikovanou teorii NMR, ovládání spektrometru a měření relaxačních dob, nukleárního Overhauserova efektu a chemických výměn. Zpracování experimentálních dat zahrnovalo několikastupňové nelineární fitování.

Teoretická část jednak představuje studovaný molekulární systém, jednak shrnuje základy teorie NMR relaxací a chemických výměn a představuje použité pulzní sekvence.

Experimentální část přehledně shrnuje provedené experimenty, jejich nastavení a zejména výsledky.

Až po provedení experimentů se ukázalo, že překlápění vodíkových vazeb je velmi rychlé, takže dostupná metodika už neumožňuje zcela přesně určení příslušných rychlostí, nicméně byla určena aktivační enthalpie celého procesu. Zpracování je provedeno korektně, jsou odhadnuty získaných parametrů

Výsledky jsou velmi zajímavé ve srovnání s dříve studovanými poli čtyř vodíkových vazeb. Vysoce hodnotím zejména samostatnost a pečlivost při provádění výpočtů.

**Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:****Práci**

- doporučuji  
 nedoporučuji  
uznat jako diplomovou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

- výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Na Albeři, 3.9.2007

Místo, datum a podpis vedoucího:

