

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Martin Plšek

Název práce: Studium vlastností nových kontrastních látek pro zobrazování magnetickou rezonancí

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: Mgr. Václav Březina, Ph.D.

Pracoviště: Katedra makromolekulární fyziky

Kontaktní e-mail: vaclav.brezina@matfyz.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/oponenta:

Bakalářská práce zkoumá dva různé koordinační komplexy ligandu $\text{do3ap}^{\text{OEt}}$ s diamagnetickým lanthanem ($\text{La}(\text{do3ap})^{\text{OEt}}$) a paramagnetickým cerem ($\text{Ce}(\text{do3ap})^{\text{OEt}}$). Díky vlivu paramagnetického atomu na relaxační doby je $\text{Ce}(\text{do3ap})^{\text{OEt}}$ kandidátem na kontrastní látku v zobrazování pomocí magnetické rezonance (MRI). Oba komplexy přecházejí mezi čtyřmi konformacemi, tato dynamika byla v této práci zkoumána analýzou chemické výměny v NMR při různých teplotách.

Celkový dojem z práce je pozitivní, student se úspěšně zhostil měření i fitování výměnných spekter. Oceňuji podrobný a jasný popis všech kroků v analýze. Byl kladen důraz na určení chyb všech parametrů. Výsledné fity teplotní závislosti p_A van't Hoffovou rovnicí (Obr. 12 a 19) mají systematickou odchylku od naměřených hodnot, což je však dáno nemožností určit přesně extrapolací Larmorovy frekvence stavů v chemické výměně. I přes to byly v práci získány termodynamické parametry, které dostatečně popisují dynamiku daného systému. Mám pouze několik připomínek:

- 1) Jazyková úroveň by mohla být lepší, v práci jsou zbytečné překlepy (např. v rovnicích (6) a (9)) a stylistické chyby (např. nekonzistence „pík“ vs. „peak“, vedlejší věty v souvětí začínající velkým písmenem nebo absence skloňování u odkazů na obrázky a tabulky).
- 2) Na str. 27 zmiňujete, že se chemický posuv pozorovaného píku nesmí dostat mimo výše extrapolovaných bodů δ_A a δ_B , přesto k tomu došlo (viz Obr. 17) a naměřené hodnoty mimo výše nebyly použity v analýze. To by mělo být okomentováno v diskuzi.
- 3) Chybí přiřazení ^3P výměnných signálů k jednotlivým diastereomerům/enantiomerům. Pokud přiřazení není možné, mělo by to být v práci napsáno.
- 4) Zkoumané molekuly by si zasloužily vlastní podkapitulu v úvodu, kde by byly shrnuty jejich relevantní známé vlastnosti (např. možnost koordinace a dekoordinace vody na $\text{La}(\text{do3ap})^{\text{OEt}}$, jen letmo zmíněné na samém konci práce).
- 5) V závěru mělo být popsáno, jak souvisí dosažené výsledky s využitím $\text{Ce}(\text{do3ap})^{\text{OEt}}$ jako kontrastní látky.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) K odhadu relaxační rychlosti $1/T_2$ jste použil pološířky příslušných píků. Ty však mohou být do značné míry ovlivněny nehomogenním rozšířením. Dokážete odhadnout velikost příspěvku nehomogenního rozšíření k pološířkám analyzovaných píků?
- 2) Lze přiřadit stavy *A* a *B* jednotlivým diastereomerům?
- 3) V případě paramagnetického komplexu $\text{Ce}(\text{do3ap})^{\text{OEt}}$ se jedná o potenciální kontrastní látku. Jsou její dynamické vlastnosti studované v této práci důležité pro její použití v MRI?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako ~~diplomovou~~/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 25.8.2023,

Václav Březina