

OPONENTNÍ POSUDEK ZÁVĚREČNÉ KVALIFIKAČNÍ PRÁCE

Autor závěrečné práce: Bc. Petr Cvejn

Název práce: Výpočty vlastností cyklodextrinů pro sensorové a medicínské aplikace

Oponent práce Ing. Richard Korytár, Ph.D.

Pracoviště opONENTA Univerzita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra fyziky kondenzovaných látek

A. Kvalita abstraktu, klíčová slova odpovídají náplni práce	Výborně (1)
B. Rozsah a zpracování rešerše	Výborně (1)
C. Řešení práce po teoretické stránce	Výborně (1)
D. Vhodnost, přiměřenost použité metodiky	Výborně (1)
E. Úroveň zpracování výsledků a diskuse	Výborně (1)
F. Vlastní přínos k řešené problematice	Výborně (1)
G. Formulace závěru práce	Výborně (1)
H. Splnění zadání (cílů) práce	Splněno
I. Skladba, správnost a úplnost citací literárních údajů	Výborně (1)
J. Typografická a jazyková úroveň (vč. pravopisu)	Výborně (1)
K. Formální náležitosti práce (struktura textu, řazení kapitol, přehlednost ilustrací)	Výborně (1)

Komentáře či připomínky:

Diplomová práca sa zaoberá teoretickým popisom vzniku komplexov cyklodextrínu a vybraných molekúl - liečiv. Použitá metodológia je na pokročilej úrovni, pomocou kvantovomechanických výpočtov z prvých princípov. Výsledky výpočtov sú intenzívne prediskutované s ohľadom na známe experimentálne výsledky, ako aj na výskumný projekt na TUL, s cieľom vyvinúť praktický medicínsky senzor.

...pokračuje na straně 2

Celkové zhodnocení:

Na práci velmi oceňuji snahu o kritický přístup k výstupům numerických výpočtů. Autor práce dokáže svoje výsledky interpretovat v kontexte už publikovaných výsledků. Taktéž práce odráží zjevnou snahu o chemické a fyzikální uchopení simulovaných procesů.

Klíčové výsledky sú v kapitole 3.7, graf 9 a graf 11, ide o závislosť celkovej energie na vzdialenosti molekuly liečiva a molekuly cyklodextrínu. Plocha celkovej energie je však omhovo komplexnejšia. Pri porovnávaní stability komplexov CI a SU by mohlo byť zaujímavé zvážiť tiež entropiu, a nie len energiu. Štúdium entropických vplyvov a komplexnosti plochy celkovej energie by však presahovalo rámec diplomovej práce. Z týchto dôvodov navrhujem hodnotiť prácu výborne.

Otázky k obhajobě:

1. V kapitole 3.6.2 bola vyslovená hypotéza vzniku vodíkových väzieb medzi oboma molekulami. Sú použité metódy PM6 (alebo B3LYP) schopné správne popísať tento relatívne slabý typ väzby?
2. Pokúste sa zovšeobecniť vaše výsledky pre dva typy liečiv (CI, SU). Na ktoré ďalšie liečivá by mohol byť navrhnutý senzor citlivý?

Celková klasifikace:

Práce splňuje požadavky na udělení akademického titulu, a proto ji doporučuji k obhajobě
Navrhují tuto práci klasifikovat stupněm **Výborně (1)**

V Praze

dne 15.6.2020

Podpisem současně potvrzuji, že nejsem v žádném osobním vztahu k autorovi práce

...


podpis oponenta