



Oponentský posudek na doktorskou disertační práci Mgr. Petra Dvořáka

Předkládaná disertační práce se zabývá použitím technik nukleární magnetické rezonance (NMR) pro zkoumání tří témat: procesu chemické výměny ve směsích lehké a těžké vody, stanovení hydrodynamického poloměru malých molekul a relaxivity magnetických nanočástic.

Disertační práce je logicky rozčleněna na teoretickou a experimentální část. Teoretická část obsahuje popis základů NMR spektroskopie. Velmi podrobně je uchopena část týkající se teorie NMR relaxací včetně vlivu chemické výměny. Experimentální část je logicky rozčleněna na tři samostatné kapitoly dle řešených témat. První kapitola se zabývá studiem chemické výměny ve směsích H_2O/D_2O , mimo jiné popisuje náročnou přípravu těchto směsí a důkladně jsou rozepsány používané modely pro popis procesů chemické výměny. V této souvislosti by pro porovnání různých modelových fitů bylo vhodnější vynést závislosti relaxačních rychlostí na echočase do jednoho grafu místo tří (grafy 2.3-2.5). Z popisu experimentálních prací v této kapitole je zřejmé, že úsilí vynaložené na metodickou přípravu včetně řešení parazitního jevu radičního tlumení a stabilizace vzorků bylo enormní a je tedy škoda, že se nepodařilo dovést tento výzkum k publikačnímu výstupu.

V druhé kapitole autor představuje nově vyvinutou metodu pro určení mikrofrikčních korekčních faktorů v Stokes-Einsteinově vztahu. Metoda byla testována na sérii různě velkých modelových molekul za použití teoretického hydrodynamického modelování a měření koeficientu translační difuze pomocí NMR spektroskopie. Výsledky byly publikovány v časopise *Molecular Physics*. Třetí kapitola popisuje měření relaxačních dob na vzorcích magnetických nanočástic oxidů železa za využití metody potlačení radičního tlumení, kterou autor vyvinul pro studium vodných vzorků. Získané výsledky jsou součástí dvou dalších publikací.

Autor se rozhodl použít neobvykle češtinu pro psaní své dizertační práce a tato volba se mi zdá správná. Jeho styl psaní je velmi poutavý a čtivý, dokonce i při popisu opakovaných a rutinních experimentů. Při psaní se opíral o anglické odborné texty a musel tak vytvořit originální text v češtině, což vedlo k vynikající srozumitelnosti práce. Navíc obohatil odbornou češtinu o několik nových termínů, jako například "slepé skeny" nebo "vodítka pro oči" (v grafech). Práce obsahuje velmi malé množství překlepů a chyb. Zmíním snad jen chybějící jednotky molárních hmotností na str. 48 nebo chybějící popis významu veličin v rovnici 3.1. Práce cituje celkem 94 zdrojů, což ilustruje dobrou orientaci autora v oboru a pečlivou rešerši. Pro další vědeckou publikační aktivitu bych doporučila omezit citování online referencí ([20]).

K práci mám několik doplňujících a upřesňujících otázek:

Jak přesně lineární byly závislosti integrálních intenzit pro určení relativního izotopového zastoupení atomů ^{17}O ?

Jaká jsou omezení vyvinuté metodiky pro určení mikrofrikčního faktoru s ohledem na velikost a tvar molekuly? V práci je zmíněna možnost použití na molekulární klastry; jaké podmínky a omezení by měly platit pro klastry?

Dá se odhadnout, jak jsou získané frikční vlastnosti ovlivněny výběrem fullerenu jako normovací molekuly (např. pokud by byla vybrána větší nebo menší molekula)?

Závěrem konstatuji, že originální vědecké výsledky a pečlivá forma zpracování dostatečně prokazují schopnost autora k samostatné tvořivé vědecké práci.

Doporučuji proto, aby tato disertační práce byla přijata k obhajobě a navrhuji, aby byl Mgr. Petrovi Dvořákovi po úspěšné obhajobě udělen doktorský titul.



V Praze, dne 21.3. 2023

Doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.