



V Praze dne 23.3.2023

Vyjádření školitele k doktorskému studiu Mgr. Petra Dvořáka

Mgr. Petr Dvořák absolvoval doktorské studium na KFNT MFF UK a vypracoval svoji disertační práci s názvem *Dynamika vodíkově vázaných sítí pohledem NMR spektroskopie*.

Téma disertační práce navazuje na diplomovou práci kandidáta a významným způsobem ji rozvíjí. Problematika stanovení struktur a procesů probíhajících ve vodě na molekulární a supramolekulární úrovni je přes svoji důležitost stále otevřenou otázkou. Stabilita samotné molekuly vody a míra ekvivalence jejích obou vodíkových atomů z hlediska existence a doby života jaderných spinových izomérů, které jsou v případě molekul vodíku H_2 (para-/ortho-vodík) použitelné pro výrazné navýšení NMR signálu některých molekul. Obdobné využití v případě vody H_2O , která by měla mít podobnou spinovou symetrii, by bylo absolutním průlomem v citlivosti např. biomolekulárních NMR měření. Směsi H_2O/D_2O byly studovány kvůli zmenšení dominantního příspěvku „běžné“ 1H - 1H dipolární relaxace a tedy lepší detekovatelnosti procesů chemické výměny pomocí měření příčné relaxace, která byla naposledy v literatuře popsána na začátku šedesátých let.

Poněkud překvapivě se ukázalo, že připravit stabilní vzorek složený jen z H_2O (resp. směsi H_2O a D_2O) je extrémně složitý úkol. Kandidát velmi trpělivě a systematicky odstraňoval/řešil všechny možné komplikace, takže postupně např. postavil křemennou destilační aparaturu, ve které vzorky připravoval přímo do křemenných NMR kyvet, které potom i dokázal zatavit plynovým hořákem. Za zdroj řady problémů jsme považovali louhování paramagnetických iontů ze skla (zásobních lahví, NMR kyvet...). Bohužel, výsledky práce ukazují, že zřejmě existují reálné chemické procesy v čisté vodě, jejichž rovnováha se ustavuje v časové škále měsíců, což přesahuje „časovou škálu“ rozumnou pro doktorský projekt. Proto problematika studia příčné relaxace 1H jaderných spinů vody zatím nebyla dokončena s jednoznačným výsledkem vhodným k publikaci.

Měření koeficientu translační difúze může sloužit ke stanovení velikosti částic na základě Stokesova-Einsteinova vztahu, což se nabízí ke stanovení velikosti clusterů molekul

vázaných vodíkovými vazbami. V případě látky složené z malých molekul, jako jsou ethanol, či voda, teoretický model přestává přesně platit, protože okolní prostředí nelze považovat za dokonalé kontinuum. Na sérii modelových látek (crownethery atp.) byly stanoveny potřebné korekční koeficienty.

Kandidát si během práce na doktorském projektu počínal iniciativně a vyvinuté experimentální postupy nabídl kolegům z katedry pro charakterizaci působení nových potencionálních kontrastních látek pro MRI na bázi feromagnetických nanočástic, což vedlo ke dvěma odborným publikacím.

Dlouhá doba řešení doktorského projektu byla zejména způsobena zejména tím, že řada nových postupů pro přípravu vzorků vody stejně nevedla k získání jednoznačných výsledků měření. Mgr. Dvořák se s touto situací i s dalšími poměrně objektivními komplikacemi (covidová omezení, hledání životní perspektivy atp.) vypořádal velmi dobře a ve stanovené době sepsal disertační práci a vyhověl dalším formálním požadavkům. Jednoznačně tedy doporučuji, aby mu byl po úspěšné obhajobě doktorské disertační práce udělen titul Ph.D..



Jan Lang