

**Oponentský posudek disertační práce RNDr. Zuzany Osifové:
Noncovalent Interactions of Biologically Active Compounds**

Disertační práce RNDr. Zuzany Osifové je sepsána v anglickém jazyce a sestává ze 145 stran textu. Práce je členěná do sedmi kapitol a následný Seznam literatury obsahuje 361 literárních odkazů. Na konci práce jsou uvedeny kopie čtyř publikací v impaktovaných časopisech.

V Úvodu jsou krátce zmíněny základní informace týkající se intermolekulárních interakcí, NMR spektroskopie a DFT výpočtů. Cíle disertační práce jsou uvedeny na straně 33.

Následují tři kapitoly: (i) vodíkové vazby u derivátů nukleových kyselin, (ii) ketoenol-diketo tautomerie v kurkuminoidech, a (iii) sekundární struktury v oligopeptidech, kde jsou společnou studovanou problematikou intermolekulární interakce prostřednictvím vodíkových vazeb u biologicky velmi zajímavých látek.

Téma disertační práce je velmi aktuální. Základní použitou metodikou, které se disertantka hlavně věnovala, je NMR spektroskopie v roztocích a některých případech i v pevné fázi. DFT výpočty a výsledky rentgenostrukturní analýzy jsou využity ke komplexnímu vyhodnocení řešené problematiky ve spolupráci s dalšími specialisty, jejichž příspěvky jsou popsány na stranách 73-74.

Výsledky uvedené v disertační práci jsou experimentálně doloženy odpovídajícím a přesvědčivým způsobem. Práce je sepsána přehledně a logicky s malým množstvím formálních chyb. Použití červené a modré barvy k rozlišení klíčových částí molekul významně usnadňuje orientaci v textu. Disertační práci RNDr. Zuzany Osifové považuji za zdařilou a domnívám se, že publikované výsledky by mohly být často citovány.

Výsledky uvedené v disertační práci již byly publikovány, což usnadňuje oponentovi práci v tom smyslu, že případné nejasnosti už byly vyřešeny v průběhu publikačního procesu.

Proto mám k práci jen několik připomínek a komentářů:

- 1) Fig. 1.7, str. 15: Na obrázku uprostřed by zřejmě měly být jinak orientovány i obě dolní molekuly.
- 2) Fig. 1.8, str. 17: Doporučil bych odstranit vzorec, protože uvedené spektrum evidentně odpovídá jen části molekuly. Pro dokumentaci převodu z časové na frekvenční doménu je obrázek dostatečně ilustrativní i bez vzorce.
- 3) Fig. 1.11, str. 22: Byla měřena směs N-H a N-D derivátů nebo byla každá látka měřena samostatně?
- 4) Fig. 1.18, str. 27: Pro případ D by bylo možné formálně přidat tautomer i se skupinou C–OH místo C=O.
- 5) Fig. 3.5 a 3.8, str. 38 a 41: Pro přehlednost mohl být paralelně uveden i obrázek ukazující posuny odpovídající methylové skupiny ve fragmentu -NHCH₃.
- 6) Fig. 3.18, str. 52: Lze vyloučit protonaci aminoskupiny?
- 7) Fig 4.1, str. 54: Ve vzorci KE chybí dvojná vazba, která je v následných vzorcích již uváděna správně.
- 8) Table 5.2.: Jak byly odčítány experimentální hodnoty interakčních konstant $J(\text{H}, \text{H})$ pro NH skupiny, když pološířky signálů jsou poměrně značné. Byla použita simulace spekter nebo byly hodnoty odečítány přímo ze spekter?
- 9) Seznam literatury, str. 76 a další: Pro čtenáře by bylo přehlednější, kdyby číslo odkazu bylo odraženo od textu směrem vlevo, jak je zvykem v publikacích, i když uznávám, že i použitá forma se v některých publikacích také uplatňuje.

Výše uvedené připomínky mají většinou charakter doporučení nebo formálního vylepšení a nijak nezpochybují dosažené výsledky.

Závěr:

Původní výsledky disertační práce byly publikovány v European Journal of Organic Chemistry, ACS Omega, Journal of Organic Chemistry a Chemical Science v rozmezí let 2021-24. RNDr. Zuzana Osifová je první autorkou u všech čtyřech publikovaných prací.

RNDr. Osifová prokázala odpovídající znalosti NMR spektroskopie, schopnost systematické vědecké práce, schopnost spolupracovat s dalšími specialisty, aby výsledky získané z NMR spektroskopie byly podloženy zejména aplikací výpočetních metod a splnila cíle disertační práce uvedené na straně 33. Na základě výše uvedených skutečností se domnívám, že disertantka vyhověla všem požadavkům kladeným na doktorské disertační práce, a proto práci RNDr. Zuzany Osifové

d o p o r u č u j i

jako podklad k dalšímu řízení k udělení vědecké hodnosti Ph.D.

Prof. Ing. Antonín Lyčka, DrSc. FRSC
Výzkumný ústav organických syntéz a.s.
Rybitví 296, 533 54 Rybitví

a

Univerzita Hradec Králové
Radlinského 62
500 03 Hradec Králové

V Pardubicích 19.4.2024