



Hodnocení školitele

Student: **Mgr. Pavel Michal**

Název disertační práce: **Optimalizace spektrometru pro měření Ramanovy optické aktivity v rozšířené spektrální oblasti**

Konzultant: **Prof. RNDr. Petr Bouř, DSc.**

Práce Mgr. Pavla Michala měla za cíl využít experimentální zázemí dlouhodobě budovaného na katedře optiky týkajícího se spektrometrů pro měření Ramanovy optické aktivity (ROA), provést měření zajímavých molekulárních systémů a vyvinout metodiku pro zpracování dat. Je možné konstatovat, že tento cíl byl plně splněn a je dobře popsán v předkládané disertační práci.

Většina výsledků popsaných v disertační práci je teoretického charakteru a probíhala v úzké spolupráci s prof. Petrem Bouřem z UOCHB. Tato teoretická část byla vždy motivována získáním nových experimentálních dat a snahou je interpretovat na molekulární kvantově chemické úrovni za účelem získat jak vhled do chování molekulárních systémů, tak zároveň prozkoumat aplikační možnosti Ramanovy optické aktivity jako citlivé analytické techniky pro chirální látky.

Jádro disertační práce představují 4 původní prvoautorské články publikované v letech 2019 – 2023. Tyto práce přinášejí nový popis nízkoeenergetických vibrací mezimolekulárních interakcí, zcela nové experimentální pozorování kombinačních vibrací ROA a jejich teoretické vysvětlení a dále pak důležitost správného popisu vlivu rozpouštědla, bez něhož není možné u některých systémů dobře vysvětlit pozorovaná spektra, jak je ukázáno například u amfetaminu a jeho analogů, studovaných ve spolupráci s prof. Setnickou z VŠCHT. Mezi výsledky vycházející přímo z měření experimentálních dat patří především určování enantiomerního přebytku chirálních látek v tekutém stavu i vodném roztoku, a dosažené přesnosti měření řádově vylepšují výsledky do té doby popsané v literatuře.

Mgr. Pavel Michal se dále podílel jako spoluautor na sepsání dalších pěti publikací, z nichž je možné vyzdvihnout dvě publikace vycházející z velmi úspěšné tříměsíční stáže na Univerzitě v Sydney ve skupině prof. Alison Rodger. Mgr. Pavel Michal se podílel na opravě ROA spektrometru právě pro tuto skupinu, během stáže spektrometr v Sydney nainstaloval a provedl měření řady proteinů. Zároveň získal zkušenosti s měřením elektronového cirkulárního dichroismu a lineárního dichroismu.

Celkově hodnotím práci jako velmi zdařilou a poměrně rozsáhlou, Pavel se účastnil vědeckých aktivit a přípravy publikací s velkým zaujetím a pilí. Potvrzuji, že předkládaná disertační práce splňuje všechny obsahové i formální náležitosti vyžadované pro její obhajobu.

V Olomouci dne 22. 1. 2024


RNDr. Josef Kapitán, Ph. D.