

Posudek vedoucího diplomové práce Bc. Ivany Hnízdové nazvané „Použití Ramanovy optické aktivity k prozkoumání konformace kyseliny askorbové (vitaminu C) a její interakce s rozpouštědlem“

Ivana Hnízdová se ve své diplomové práci zabývala využitím Ramanovy spektroskopie a Ramanovy optické aktivity (ROA) ke studiu struktury a konformací kyseliny askorbové a její sodné soli – askorbátu sodného. Těžiště práce spočívalo v simulacích spekter na *ab initio* úrovni a to jak s využitím implicitního modelu rozpouštědla, tak i s využitím molekulové dynamiky a simulací klastrů kyseliny askorbové s molekulami vody, což se ukázalo jako velmi důležité k vysvětlení experimentálních spekter. Kromě simulací se Ivana Hnízdová zabývala také experimentálním měření spekter Ramanovy optické aktivity a titračními měřeními – měření závislosti Ramanových spekter na pH, z nichž bylo možné po zpracování dat ověřit pK konstanty a hlavně i správnost předpokladů o deprotonovaných formách kyseliny askorbové.

Velmi oceňuji, že studentka úspěšně pronikla do pro ni nové tematiky kvantově chemických výpočtů. Hlavním přínosem práce pak je získání velkého množství původních dat, která budeme dále připravovat k publikaci. Nové poznatky jsou o to zajímavější, že u vitamínu C bylo možné předpokládat již jeho podrobnou znalost popsanou v literatuře. Rozhodně je možné říci, že se podařilo získat lepšího souladu mezi experimentálními Ramanovými spektry a simulacemi, ROA spektra doposud analyzována vůbec nebyla. Bylo zjištěno, že u askorbátu sodného existuje relativně významné zastoupení formy, která nebývá obvykle uvažována.

Rozsah práce považuji za velký, stejně jako množství získaných původních výsledků. Jazykovou, formální i grafickou úroveň práce považuji za velmi dobrou.

Diplomovou práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnotit stupněm A.

V Olomouci dne 23. května 2022

RNDr. Josef Kapitán, Ph. D.
Katedra optiky
Přírodovědecká fakulta UP