Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

❑ posudek vedoucího ☒ posudek oponenta
☒ bakalářské práce ❑ diplomové práce

Autor: *Filip Šebesta*
Název práce: *Studium interakcí komplexů přechodných kovů s biomolekulami metodami kvantové chemie*
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Zuzana Sochorová Vokáčová, Ph.D.
Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i
Kontaktní e-mail: zuzana.vokacova@uochb.cas.cz

Odborná úroveň práce:
☒ vynikající ❑ velmi dobrá ❑ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Věcné chyby:
☒ téměř žádné ❑ vzhledem k rozsahu přiměřený počet ❑ méně podstatné četné ❑ závažné

Výsledky:
☒ originální ❑ původní i převzaté ❑ netriviální kompilace ❑ citované z literatury ❑ opsané

Rozsah práce:
☒ veliký ❑ standardní ❑ dostatečný ❑ nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:
❑ vynikající ❑ velmi dobrá ☒ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Tiskové chyby:
❑ téměř žádné ☒ vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet ❑ četné

Celková úroveň práce:
☒ vynikající ❑ velmi dobrá ❑ průměrná ❑ podprůměrná ❑ nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Předložená bakalářská práce Filipa Šebesty „*Studium interakcí komplexů přechodných kovů s biomolekulami metodami kvantové chemie*“ je výpočetní studie zaměřená na reakcí 2'-deoxyguanosid-5'-monofosfátu s platičitým komplexem Pt^{IV} (dach)Cl_4 za vzniku komplexu Pt^{IV}(dach)Cl_3(N7-cGMP). Tato reakce je uvažována ve dvou různých cestách. Obě cesty jsou v práci popsány přehledných schématem. Práce si klade za cíl přispět k osvětlení rozsáhlé problematiky komplexů s platinou.

Po formální stránce je práce vyvážená. Autor nejdříve stručně shrnuje vývoj studia organokovových komplexů. Dále pak v následující kapitole popisuje teoretické základy všech metod a přístupů, které byly ve vlastní práci použity. Samotné výsledky, včetně popisu optimalizace, jsou shrnuty v posledních kapitolách, kde jsou kromě jiného prezentovány formou tabulek a obrázků. Studovaná problematika je tím pádem zpracovávána systematicky. Seznam použité literatury poukazuje na autorovo dostatečné seznámení se se studovanou problematikou.

Práce Filipa Šebesty svou prací navazuje na dlouhodobý program výzkumu na KCHFO. Výpočetní metody použité v této práci považuji za adekvátní k popisu studovaného systému, stejně jako zvolené báze. Autor svůj postup vysvětluje dostatečně, a popis výpočetního protokolu umožňuje jeho reprodukování. Prezentace výsledků formou tabulek je přehledná. Na konci práce krátce navrhuje další možný postup při zkoumání dané problematiky.

Filip Šebesta svou předkládanou prací prokazuje, že si dostatečně osvojil základy kvantově-chemických metod a pomocí nich splnil vytyčené cíle. Jeho výsledky přinášejí nové poznatky v oblasti organokovové chemie a přispívají k vědeckému programu celého kolektivu. Práce splňuje požadavky na bakalářskou práci, a proto ji doporučuji k obhajobě s hodnocením výborně.

Spíše pro potřeby autora bych se ráda zmínila, že pro psaní jakékoliv další práce by bylo doporučeníhodné hlouběji se seznámit s pravidly českého pravopisu a obecně uznávanými pravidly úprav psaní textu, a to zejména pokud jde o počet teček za větou, umístění mezer mezi slovy a odsazení prvních řádků odstavců. Bylo by vhodné také se držet navržených úprav v dokumentu „Úprava bakalářské práce“, kterou Matematicko-fyzikální fakulta na svých webových stránkách pro své studenty nabízí. Například navržené řádkování 1,5 by velice usnadnilo čtení posuzované práce. Graficky poněkud matoucí se mi také jeví číslování rovnic, které je shodné s číslováním literatury. To by například šlo rozlišit jiným druhem závorky. Kvalitní bakalářské práce jakou tato práce bezesporu je, by si kvalitnější stylistické zpracování zasloužila.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

K práci mám tyto dotazy:

1. V úvodu práce se autor zmiňuje o řadě vedlejších účinků v souvislosti s užíváním dosavadních léků s komplexem platiny s oxidačním číslem II. Mohl by některé z těchto vedlejších účinků jmenovat. Studium komplexů s platinou Pt^{IV}, k nimž přispívá i tato práce, je sice velice obsáhnou kapitolou, mohl by ale autor dále krátce komentovat, zda již existují nějaké indicie, že nově použitá léčiva s platinou Pt^{IV} již problém s těmito vedlejšími účinky mít nebudou?
2. Na straně 20 se autor vyjadřuje k náročnosti výpočtů za použití explicitního solventu a zdůvodňuje, proč bylo v práci použito implicitního solventu. Mohl by autor na některé ze svých modelových struktur odhadnout časovou náročnost použití explicitního solventu? Do jaké míry by použití explicitního solventu ovlivnilo získané výsledky?

3. Autor se v textu dvakrát (str. 31 a 41) odkazuje na tabulku číslo 17. Z textu vyplívá, že nejde o typografickou chybu, a že tabulka byla pravděpodobně vypuštěna v některé předchozí verzi práce. Prosím autora o prezentaci této tabulky a krátký komentář.

Práci
☒ doporučuji
❑ nedoporučuji
uznat jako ~~diplomovou~~/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:
☒ výborně ❑ velmi dobře ❑ dobře ❑ neprospěl/a

Místo, datum a podpis ~~vedoucího~~/oponenta:

V Praze 1.6. 2011, RNDr. Zuzana Sochorová Vokáčová, Ph.D.