Posudek na bakalářskou práci pana **Filipa Šebesty**: **"** Studium interakcí komplexů přechodných kovů s biomolekulami metodami kvantové chemie.**".**

Pan Filip Šeesta začal velmi pilně a svědomitě pracovat na své bakalářské práci hned po jejím zadání. Díky svému značnému pracovnímu nasazení rychle zvládl práci s operačním systemem Linux i kvantově-chemickými programy Gaussian 09, NBO 5 a AIMAll, které používal k výpočtům studovaného reakčního mechanismu. Rovněž se naučil provádět analýzy vlnové funkce a určovat termodynamické parametry chemických reakcí. Tím se také zapojil do řešení grantového projektu ME10149 "Studium interakcí transitních kovů s modely biomolekul".

Bakalářská práce je po grafické stránce na výborné úrovni, je napsána přehledně, všechny vypočtené výsledky jsou diskutovány v přiměřeném rozsahu a pro snadnou orientaci v texu doplněny názornými schematickými vzorci.

Po odborné stránce bych rád zdůraznil značný objem výsledků, které díky svému pracovnímu nasazení dosáhl. Studovaná reakce byla popsána pomocí tří různých modelů: v plynné fázi metodami Hartreeho-Focka a DFT a v prostředí spojitého kontinua na úrovni DFT přiblížení.

Pan Filip Šebesta je student s vynikajícím prospěchem, který po celou dobu pracoval samostatně a velmi spolehlivě.

Bakalářskou práci plně doporučuji k obhajobě navrhuji klasifikovat ji jako výbornou.

V Praze 14.6. 2011

Doc. Jaroslav Burda, DrSc.