

Posudek na diplomovou práci pana **Lud'ka Michery**:  
**"Studium elektronových vlastností platinových komplexů metodami kvantové chemie"**.

Pan Luděk Michera začal pracovat na naší katedře ve 4. ročníku svého studia a rychle se zapojil do řešení grantového projektu "Studium interakcí transitních kovů s modely biomolekul". Diplomant postupně zvládl ovládání kvantově-chemických programů, které bylo nutno použít k výpočtům různých energetických příspěvků a analýz vlnové funkce.

Díky jeho pracovnímu nasazení byl získán úplný termodynamický popis interakce studovaných komplexů s aminokyselinou glycinem jak v plynné fázi tak i v roztoku použitím přiblížení implicitního solventu.

Výsledky diplomové práce měly být v současné době prezentovány na mezinárodní konferenci „Modelling and Design of Molecular Materials 2006” ve Wroclavi a budou během krátké doby připraveny do formy původního vědeckého sdělení a poslány do časopisu J. Inorg. Biochem.

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

Pan Luděk Michera studoval po celou dobu s vynikajícím prospěchem, pracoval samostatně a ke konci studia rovněž velmi spolehlivě. V případě úspěšné obhajoby a složení SZZ bude na daném tématu pokračovat v rámci postgraduálního studia.

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

V Praze 15.8. 2006

Doc. Jaroslav Burda