

UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ

Katedra anorganické a organické chemie
Studijní program: Zdravotnická bioanalýtika

Posudek vedoucího / školitele bakalářské práce

Autor/ka práce: **Ondřej Horáček**

Vedoucí / školitel práce: PharmDr. Karel Palát, CSc.

Rok zadání: 2014

Konzultant:

Rok obhajoby: 2016

Název práce:

Výpočty parametrů biologicky aktivních látek pomocí kvantově chemických metod.

Téma práce si autor/ka vybral/a z nabídky katedry.

Práce s literaturou autora/ky byla výborná.

Jazyková vybavenost autora/ky byla výborná.

Invence autora/ky byla výborná.

Iniciativa autora/ky byla výborná.

Autor/ka pracovala samostatně, zodpovědně.

Problémy, pokud se vyskytly, řešil/a samostatně.

Metodická zdatnost a zručnost autora/ky byla výborná.

Interpretace výsledků byla správná a zcela samostatná.

Hodnocení výsledků v kontextu jiných prací bylo zodpovědné.

Práce v kolektivu, kooperativnost autora/ky byla výborná.

Zpracování textu práce bylo samostatné, s malými korekcemi a bylo velmi pečlivé.

Grafická a jazyková úprava byla výborná.

Působení autora/ky na katedře bylo přínosné.

Slovní hodnocení, výrazné rysy autora/ky a práce:

Bakalářská práce Ondřeje Horáčka nazvaná „Výpočty parametrů biologicky aktivních látek pomocí kvantově chemických metod“ se zabývá získáním QSAR parametrů látek s antifungální aktivitou in silico metodami.

Během své práce si student úspěšně osvojil počítačové metody potřebné k vytvoření modelů zadaných sloučenin, k výpočtu QSAR parametrů i ke zpracování výstupních souborů a vyextrahování žádaných dat.

Také při zpracovávání literárních údajů a sepisování bakalářské práce si autor počínal iniciativně, samostatně a s patřičnou erudicí.

Předložená bakalářská práce Ondřeje Horáčka plně odpovídá svým obsahem a zpracováním požadavkům kladeným na bakalářské práce, a proto ji doporučuji k obhajobě.

Celkové hodnocení: výborně, k obhajobě: doporučuji

V Hradci Králové dne 28.5. 2016

.....
podpis