

Posudek na diplomovou práci Bc. Filipa Šebesty:
„Studium elektronových vlastností a reakčních mechanismů komplexů
Pt(IV) metodami kvantové chemie.“

Pan Filip Šebesta začal pracovat na katedře chemické fyziky a optiky již ve 3. ročníku svého studia. Postupně zvládl potřebné nástroje kvantové chemie, které bylo nutno použít k výpočtům různých energetických příspěvků a k analýzám vlnových funkcí studovaných komplexů.

Jeho úkolem bylo nalézt strukturní a termodynamické vztahy v redoxním systému platinových komplexů s guanosinmenefosfátem. Diplomant díky své iniciativě a pracovitosti provedl výpočty nejenom pro koordinaci guaninu s platinou, ale i následný vznik hydratované struktury. Pro úplnost spočítal rovněž detailní mechanismus redukce Pt(IV) komplexu v přítomnosti Pt(II), což by měla být energeticky nejvýhodnější reakční cesta pro koordinaci platiny k N7 pozici guaninu. Ve své práci se mu podařilo vysvětlit rozdílnou aktivitu cisplatin v kolmém a rovinném uspořádání adduktu Pt-G. V současné době se zabývá rozšířením reakčního modelu pomocí QM/MM metody, kdy je rovněž explicitně simulována přítomnost molekul rozpouštědla (vody). Z důvodů nepředpokládaných komplikací při aplikaci tohoto rozšířeného modelu nakonec diplomant byl nucen upustit od prezentace této části výpočtů v diplomové práci. Nicméně i bez ní představuje předložená práce velké množství hodnotných výsledků z nichž je v současné době dokončován rukopis článku pro časopis *Inorganic Chemistry*, jehož „impact factor“ je vyšší než 3.0.

Diplomovou práci sepsal pan Šebesta samostatně po nastudování potřebné odborné literatury na dané téma platinových interakcí. Její grafická úprava je na velmi dobré úrovni s minimálním počtem překlepů a jiných formálních chyb.

Na závěr je nutno říci, že Bc. Filip Šebesta studoval po celou dobu s velmi dobrým prospěchem, má hluboké vědomosti v oblasti chemické fyziky a biofyziky.

Rovněž jeho znalost výpočetní techniky a operačního systému linux je na velmi dobré úrovni.

Diplomovou práci navrhuji klasifikovat jako výbornou.

V Praze 20.5. 2013

prof. RNDr.Ing. Jaroslav Burda, DrSc.