

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího
 bakalářské práce
- posudek oponenta
 diplomové práce

Autor/ka: *Katarína Baxová*

Název práce: *Studium vlastností a reaktivity bioanorganických komplexů přechodných kovů metodami kvantové chemie*

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika - Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2014

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.sochorova@centrum.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 Kataríny Baxové „*Studium vlastností a reaktivity bioanorganických komplexů přechodných kovů metodami kvantové chemie*“ popisuje výpočetní studii zabývající se reakcemi dirhodiového komplexu s guaninem. Studentka v práci uvažuje šest různých reakčních variant a pro všechny z nich v předkládané práci uvádí z výpočtů získané reakční parametry. Práce samotná si klade za cíl přispět k osvětlení rozsáhlé problematiky bioanorganických komplexů přechodných kovů, jakožto problematiky dlouhodobě řešené na KCHFO.

Po formální stránce je práce vyvážená. Studovaná problematika je zpracovávána pro čtenáře systematicky. V tomto bodě zvláště oceňuji detailně popsany způsob výpočtů, který umožňuje jejich opětovné reprodukování. Výpočetní metody použité v této práci považuji za adekvátní k popisu studovaných systémů. Všechny zmiňované varianty systému i reakční cesty jsou v práci srozumitelně popsány a výsledky zaznamenány v tabulkách. Presentace výsledků formou těchto tabulek je přehledná. Práce je doplněna o obsáhlou část příloh.

Katarína Baxová svou předkládanou práci, množstvím získaných výsledků a jejich výborným zpracováním, prokazuje, že si dostatečně osvojila základy kvantově-chemických metod a pomocí nich splnila cíle vytyčené v zadání. Práce splňuje požadavky na bakalářskou práci, a proto ji doporučuji k obhajobě s hodnocením výborně.

Spíše pro potřeby autorky bych se ráda zmínila, že vhodná volba slov v odborném textu a konzistentní používání gramatických časů mnohdy usnadňuje samotné čtení. Základem vědecké práce sice není text samotný, ale psané slovo je nejčastějším způsobem, jímž jsou vědecké výsledky sdělovány ostatním.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Bez dotazů.

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Odoleně Vodě 15. 8. 2014, RNDr. Zuzana Sochorová Vokáčová, Ph.D.

