

## POSUDEK BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

*Jméno a příjmení studenta:* **Kristýna Švecová**  
*Studijní obor:* Biofyzika a zdravotnická technika  
*Oponent bakalářské práce:* Mgr. Michal Kutý, Ph.D.  
*Katedra:*  
*Název bakalářské práce:* „Atoms in molecules“ (AIM) analýza Pt(II) – komplexů

*Volba tématu:*

1. Mimořádně aktuální
2. Aktuální pro danou oblast
3. Užitečné a prospěšné
4. Standardní úroveň
5. Neobvyklé

*Cíl práce a jeho naplnění:*

1. Vhodně zvolený cíl, který byl naplněn
2. Vhodně zvolený cíl, který byl částečně naplněn
3. Vhodně zvolený cíl, který nebyl naplněn
4. Nevhodně zvolený cíl

*Struktura práce:*

1. Originální – zdařilá
2. Logická – systémová
3. Logická – tradiční
4. Pro dané téma tradiční
5. Pro dané téma nevhodná

*Práce s literaturou:*

1. Vynikající, použity dosud neběžné prameny
2. Velmi dobrá, použity nejnovější dostupné prameny
3. Dobrá, běžně dostupné prameny
4. Slabá, zastaralé prameny

*Vybavení práce (data, tabulky, grafy, přílohy):*

1. Mimořádné, funkční
2. Velmi dobré, funkční
3. Odpovídá nutnému doplnění textu
4. Nedostačující

*Přínosy bakalářské práce:*

1. Originální, inspirativní názory
2. Ne zcela běžné názory
3. Vlastní názor argumentačně podpořený
4. Vlastní názor chybí

*Uplatnění bakalářské práce v praxi a ve výuce:*

1. Práci lze uplatnit v praxi
2. Práci lze uplatnit ve výuce
3. Vhodná pro publikování
4. Práci nelze příliš využít ani v praxi ani při výuce

*Formální stránka:*

1. Výborná
2. Velmi dobrá
3. Přijatelná
4. Nevyhovující

*Vybavení práce (data, tabulky, grafy, přílohy):*

1. Mimořádné, funkční
2. Velmi dobré, funkční
3. Odpovídá nutnému doplnění textu
4. Nedostačující

*Přínosy bakalářské práce:*

1. Originální, inspirativní názory



- Jazyková stránka:
1. Stylistika a) výborná  
b) velmi dobrá  
c) dobrá  
d) nevyhovující
  2. Gramatika a) výborná  
b) velmi dobrá  
c) dobrá  
d) nevyhovující

Zásadní připomínky k bakalářské práci:

1. nemám
2. mám tyto:

.....  
.....  
.....

Další hodnocení:

Téma bakalářské práce je aktuální, neboť uvedené *in silico* metody mohou nalézt uplatnění v moderním výzkumu při simulacích a interpretacích experimentálně náročných studií.

Bakalářská práce je logicky členěna na standardní části. V první obsáhlé kapitole jsou stručně popsány základní fyzikální a chemické pojmy, které souvisejí s tématem práce, nicméně chtěl bych nejprve upozornit na formální nedostatky, jako jsou občasné překlepy, interpunkce nebo na několika místech chybné systematické pojmenování platinových komplexů, například správný systematický název cisplatiny je podle IUPAC (SP-4-2)-diammindichloridoplatina. Autorka práce si bohužel neporadila s kvalitou obrázků č. 3, 4, 6, a 8, kde byly použity rastrový formát s nízkým rozlišením. Na str. 14 je v souvislosti s definicí kovalentní vazby sigma a vazby pi nepřesně uvedena podstata vzniku těchto lokalizovaných molekulových orbitalů. V cílech práce je chybně uveden chemický vzorec studovaných sloučenin v základním i v transičním stavu (viz indexy u ligandů). Dále bych chtěl upozornit na str. 32, kde je uveden nepochopitelně stručný a hlavně neúplný popis cílů a hypotéza bakalářské práce.

Další hodnocení:

Chtěl bych ocenit kapitoly, které se zabývají přehledem farmakologických účinků platinových komplexů, především cisplatiny a jejich derivátů. Obsahem práce jsou však deriváty transplatiny, u níž, jak je uvedeno v práci i v literatuře, cytostatické účinky doposud nebyly prokázány. V práci mi proto chybí zdůvodnění, zda je kromě určité přínosného testování výpočetní metody AIM na transplatinových komplexech ve hře i konkrétní zájem z hlediska farmakologického výzkumu?

K samotným výsledkům práce výhrady nemám, korelace vazebné délky a interakčních energií s elektronovou hustotou v kritickém bodě vazby platina – voda je zřejmá a je poměrně podrobně analyzována. V diskuzní části práce i v závěrech oceňuji srozumitelný přehled dosažených výsledků.

Název cisplatiny je podle IUPAC (SP-4-2)-diammindichloridoplatina. Autorka práce si bohužel neporadila s kvalitou obrázků č. 3, 4, 6, a 8, kde byly použity rastrový formát s nízkým rozlišením. Na str. 14 je v souvislosti s definicí kovalentní vazby sigma a vazby pi nepřesně uvedena podstata vzniku těchto lokalizovaných molekulových orbitalů. V cílech práce je chybně uveden chemický vzorec studovaných sloučenin v základním i v transičním stavu (viz indexy u ligandů). Dále bych chtěl upozornit na str. 32, kde je uveden nepochopitelně stručný a hlavně neúplný popis cílů a hypotéza bakalářské práce.

Bakalářská práce nebyla publikována v odborné literatuře, nicméně lze konstatovat, že autorka práce obohatila výzkum na universitním pracovišti o nové poznatky v oblasti teoretické chemie platinových komplexů a prokázala schopnost řešit výzkumný projekt samostatně. Z uvedených důvodů doporučuji práci k obhajobě a navrhuji stupeň hodnocení „velmi dobře“.

Práce splňuje základní požadavky kladené na tento typ prací, a proto ji doporučuji k ústní obhajobě:

1. ano
2. ne

Navrhovaná klasifikace:

1. výborně
2. velmi dobře
3. dobře
4. nevyhověl

Otázka k ústní obhajobě práce:

Prosím o vysvětlení významu korelační studie elektronové hustoty v kritických bodech.

Bakalářská práce nebyla publikována v odborné literatuře, nicméně lze konstatovat, že autorka práce obohatila výzkum na universitním pracovišti o nové poznatky v oblasti teoretické chemie platinových komplexů a prokázala schopnost řešit výzkumný projekt samostatně. Z uvedených důvodů doporučuji práci k obhajobě a navrhuji stupeň hodnocení „velmi dobře“.

Datum: ...3.6.2011... Podpis oponenta bakalářské práce: 

Práce splňuje základní požadavky kladené na tento typ prací, a proto ji doporučuji k ústní obhajobě:

1. ano
2. ne

Navrhovaná klasifikace:

1. výborně
2. velmi dobře
3. dobře
4. nevyhověl

Otázka k ústní obhajobě práce:

Prosím o vysvětlení významu korelační studie elektronové hustoty v kritických bodech.

Datum: ...3.6.2011... Podpis oponenta bakalářské práce: .....