

Posudek oponenta na diplomovou práci

Jméno autora: Bc. Aleš Kalup (AK)

Název práce: Kvantově chemické studium mechanismů izomerací planárních komplexních sloučenin platiny a palladia

Jméno oponenta : doc. RNDr. Jaromír Marek, Ph.D.

Má práce tvůrčí charakter: Ano

Grafická úroveň práce: A/výborná

Textová úroveň práce: A/výborná

Odborná úroveň práce/dodržení zadání: C/dobře

Slovní hodnocení, připomínky:

Diplomová práce (DP) svým rozsahem odpovídá požadavkům kladeným na závěrečnou práci studenta magisterského studijního programu.

V první – teoretické části (26 stran) DP se AK postupně věnuje popisu biologických vlastností přechodných prvků, izomerizaci u komplexních sloučenin a zvláště komplexů Pt^{II} a Pd^{II} , popisu fotochemicky iniciovaných reakcí, a v závěru na 6 stranách textu i základům výpočetních metod kvantové chemie (QM).

Při sepisování teoretické části DP si ale AK pravděpodobně neuvědomil, jaké dostal zadání (*Vypracujte literární rešerši týkající se problematiky kvantově-chemického popisu strukturních a energetických změn souvisejících s izomerií koordinačních sloučenin...*), a k popisu *state of the art* metod QM používaných při studiu koordinačních sloučenin či recentním odborným publikacím věnujícím se této problematice se vůbec nedostal. Navrhuji napravit toto opomenutí při obhajobě, a ústní prezentaci AK v úvodní části zaměřit zejména na toto téma.

Ve druhé, „experimentální části“ (jde-li tedy v případě DP zaměřené na výpočetní chemii mluvit o experimentu v pravém smyslu slova, a nebylo-li by proto vhodnější mluvit o části výpočetní) se AK na 17 stranách textu věnuje popisu a komentování výsledků získaných při modelování diammin-dichloroplatiného komplexu (cisplatina) metodami HF a DFT. Nemohu zde nevznést jednu připomínku: přes jednoznačné zadání DP (*...porovnejte výsledky získané na úrovni Hartreeho-Fockovy aproximace, teorie funkcionálu hustoty a Møllerovy-Plessetovy perturbací teorie...*) jsem v práci nenašel sebekratší odůvodnění nepoužití metody MP2.

Otázka do diskuze:

Nenapadly AK po pročtení si článků s recentními výsledky modelování Pt^{II} komplexů nějaké další, jím osobně dosud nevyzkoušené přístupy (metody, výpočetní báze, ECP...) které by mělo smysl při QM modelování cisplatiny použít? A pokud ano, tak jaké?

Závěr: Práci doporučuji k obhajobě a zatím - před vyslechnutím obhajoby - navrhuji hodnocení známkou C.

V Brně dne: 2.5.2011