

Posudek bakalářské práce Thuy Duong Nguyenové

„Stabilita komplexních sloučenin platiny a mechanismy jejich izomerací a hydrolyzy: kvantově-chemická studie“

Předložená bakalářská práce Thuy Duong Nguyenové je zaměřena na kvantově-chemickou analýzu mechanismů hydrolyzy vybraných čtvercově planárních komplexů platiny. Cílem bakalářské práce bylo především se seznámit s problematikou působení biologicky aktivních látek na bázi koordinačních sloučenin přechodných kovů, osvojit si pojmy reakční mechanismus, hyperplocha potenciální energie, tranzitní stav, reakční kinetika, apod., a seznámit s metodami současné teoretické chemie a možnostmi, které v rámci studia reakčních mechanismů nabízejí. V rámci experimentální části práce se autorka věnovala teoretické analýze strukturních a energetických změn, které mohou nastávat v průběhu hydrolytických reakcí.

Bakalářská práce je formálně dělena na kapitoly *Úvod*, *Teoretická část*, *Výsledky a diskuse*, *Závěr* a *Reference*. *Teoretická část* je věnována jednak biologicky aktivním sloučeninám přechodných kovů a mechanismům jejich hydrolyzy a izomerací, jednak základním informacím o metodách současné teoretické chemie, a způsobům teoretické analýzy reakčních mechanismů a lokalizace stacionárních bodů na hyperploše potenciální energie. Celá kapitola je zpracována přehledně a srozumitelně.

V rámci experimentální části, shrnuté v kapitole *Výsledky a diskuse*, se autorka pokusila analyzovat mechanismus dvoustupňové hydrolyzy čtyř čtvercově planárních komplexů platiny. Problematika byla řešena na úrovni teorie funkcionálu hustoty (DFT). Z hlediska lokalizace stacionárních bodů a popisu jejich geometrie lze studii analyzovaných mechanismů považovat za úspěšnou. Kvantifikaci energetických změn se z důvodu metodicky velmi problematických výpočtů, i přes řadu pokusů o alternativní řešení, nepodařilo smysluplně dokončit. Odpovídající výpočty nicméně nadále probíhají.

Kapitola *Závěr* představuje stručný přehled výsledků získaných jak v rámci části řešeršní, tak i v rámci části experimentální.

Závěrem lze konstatovat, že se autorce bakalářské práce podařilo úspěšně splnit podstatné cíle formulované v zadání, byť část realizovaných výpočtů dosud nevedla k pozitivnímu výsledku. Bakalářská práce je dobře zpracována po formální i obsahové stránce. Je rovněž třeba vyzdvihnout studentčin zájem o problematiku spojenou s bakalářskou prací, ochotu učit se novým věcem, a ve výsledku také schopnost kvalifikovaně diskutovat o realizovaných úlohách i navrhnout vlastní postupy jejich řešení.

Předložená práce splňuje kritéria kladená na bakalářské práce řešené na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci, a proto ji **doporučuji** k obhajobě a navrhuji hodnocení

V Olomouci dne 19. 6. 2020

.....
Michal Čajan