



HODNOCENÍ ZÁVĚREČNÉ KVALIFIKAČNÍ PRÁCE POSUDEK VEDOUCÍHO

Autor závěrečné práce: Bc. Petr Cvejn

Vedoucí práce: Ing. Pavel Márton, Ph.D.

Název práce: Výpočty vlastností cyklodextrinů pro sensorové a medicínské aplikace

- A. Úplnost abstraktu, klíčová slova odpovídají náplni práce Výborně (1)
- B. Kvalita zpracování rešerše Výborně minus (1-)
- C. Řešení práce po teoretické stránce Výborně (1)
- D. Vhodnost, přiměřenost použité metodiky Výborně (1)
- E. Úroveň zpracování výsledků a diskuse Výborně (1)
- F. Vlastní přínos k řešené problematice Výborně (1)
- G. Formulace závěru práce Výborně (1)
- H. Splnění zadání (cílů) práce Splněno
- I. Skladba, správnost a úplnost citací literárních údajů Výborně (1)
- J. Typografická a jazyková úroveň (vč. pravopisu) Velmi dobře (2)
- K. Formální náležitosti práce Výborně (1)
(struktura textu, řazení kapitol, přehlednost ilustrací)
- L. Přístup studenta k řešení (samostatnost, aktivita, ...) Výborně (1)

Komentáře či připomínky:

Předložená práce Petra Cvejna se zabývá tématem senzorické aplikace cyklodextrinů, které je na TUL dlouhodobě studováno experimentálně, a představuje první krok výpočetního přístupu k problematice.

V teoretické části práce se autor věnuje použitým metodám, shrnuje výsledky předchozích prací a podává přesvědčivou motivaci k výpočtům, které jsou provedeny v praktické části. Jde o rozsáhlou sadu výpočtů, které se zabývají cyklodextriny, jejich interakce se zvolenými léčivy, ale i menšími stavebními jednotkami těchto molekul. Výpočty jsou provedeny logicky a je vždy jasná jejich motivace. Autor si klade otázky, vytváří hypotézy a ty testuje. Zvolené techniky jsou adekvátní a ve shodě se současným poznáním. Z textu je také jasné, které výpočty naopak nebylo možné v rámci diplomové práce provést a stály by za prozkoumáním. V celém textu jsou jednotlivá tvrzení doprovázena bohatými odkazy do literatury.



... pokračuje na straně 2





Celkové zhodnocení:

Na získané výsledky a tvrzení autor pohlíží kriticky, vždy je komentuje a interpretuje, a to jak ve vztahu k předchozím pracem provedeným na TUL, tak k datům z literatury. Dozvídáme se které zdroje hypotézy podporují a které ne. Autorova dobrá práce s literaturou zároveň umožňuje pohlížet na práci přísnější vědeckou optikou. Text je doprovázen množstvím pěkně provedených vizualizací. Práci vytýkám občasnou přílišnou strohost, která je na úkor pochopitelnosti a zbytečně se vyskytující gramatické nedokonalosti. Některá tvrzení by snad mohla být méně kategorická. Jinak však autor předkládá svěží, ucelený a aktuální text, který se dobře čte.

Závěrem: práce přináší relevantní data, která mohou být využita k pochopení senzorických vlastností cyklodextrinů, a jistě poslouží jako solidní základ pro další studentské práce. Zadání je splněno, jeho některé body jsou rozpracovány daleko za rámec typické diplomové práce. Po formální stránce jsou splněny náležitosti požadované fakultou. Oceňuji studentovu samostatnost v celém průběhu práce na tomto tématu. Bez pochybností navrhuji hodnotit stupněm výborně.

Otázky k obhajobě:

- 1) Grafy 9 a 11 udávají závislost celkové energie pro dva cyklodextriny a molekulu léčiva na vzdálenosti primárních okrajů cyklodextrinů. Komentujte které ze získaných bodů jsou fyzikálně významné a jak by šla obejít omezení plynoucí z aktuálně zvolené metodiky.
- 2) Čím si vysvětlujete velký rozdíl struktury molekuly léčiva získané metodou PM6 (oproti B3LYP, str. 39 dipl. práce), avšak dobrou shodou této metody s experimentálními daty (Stewart 2009)?

Kontrola plagiátů:

Míra shody podle STAG 0 % (viz www.IS/STAG)

Komentář v případě shody nad 5 %:

Celková klasifikace a doporučení k obhajobě:

Práce splňuje požadavky na udělení akademického titulu, a proto ji doporučuji k obhajobě
Navrhuji tuto práci klasifikovat stupněm: Výborně (1)

Podpisem současně potvrzuji, že nejsem v žádném osobním vztahu k autorovi

V Liberci

dne 19.6.2020

