

Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- | | |
|--|--|
| <input type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input checked="" type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input checked="" type="checkbox"/> bakalářské práce | <input type="checkbox"/> diplomové práce |

Autor/ka: Hana Barvíková

Název práce: Počítačové modelování interakcí molekul s minerálními povrchy

Studijní program a obor: Měřicí a výpočetní technika

Rok odevzdání: 2012

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Mgr. Martin Kabeláč, Ph.D.

Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR

Kontaktní e-mail: martin.kabelac@uochb.cas.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:

Slečna Hana Barvíková vypracovala svou bakalářskou práci na téma Počítačové modelování interakcí molekul s minerálními povrchy. Práce v nadstandardním rozsahu 81 strany je napsána v českém jazyce, stylisticky jasně a pouze s minimálním množstvím překlepů. Dílo je rozděleno do 7 kapitol, přičemž v úvodní části autorka srozumitelně popsala základy počítačových simulací. Cenná je druhá kapitola, která představuje stručný a snadno pochopitelný návod, jak provádět simulace v prostředí programu Gromacs. V dalších kapitolách autorka poutavě seznamuje čtenáře se svými výsledky, a to simulacemi adsorpčních procesů organických molekul na nabitém a nenabitém křemenném povrchu. Kromě jasného zformulování dosažených výsledků hodnotím vysoce i grafickou kvalitu obrázků a schopnost autorky osvojit si v relativně krátkém čase základní techniky používané v počítačových simulacích.

K práci mám i několik negativních připomínek. Předně mě mrzí, že autorka zcela pominula uvést důvody, resp. motivace jež vedly k této její vědecké činnosti. Dále je třeba podotknout, že v práci se vyskytuje i několik málo věcných i formálních chyb, např. na str. 6 je uvedeno „*Nízká potenciální energie vypovídá o stabilitě molekuly. Umožňuje tak stanovit nejstabilnější a tedy nejpravděpodobnější molekulovou konformaci.*“ Toto tvrzení je nepravdivé, neboť autorka zcela pomíjí vliv entropie, která, u systémů které autorka zkoumala, může mít dost podstatný vliv na populaci jednotlivých konformerů. Na obr. 32 je y-osa popsána jako hodnota úhlu, ačkoliv jak z hodnot a textu vyplývá, jedná se o kosinus tohoto úhlu. Ačkoliv práce je napsána v českém jazyce, vadí mi i popisky grafů v angličtině.

Přes tyto nedostatky hodnotím práci jako nadprůměrnou a rád ji doporučuji k obhajobě.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Na základě mé úvodní připomínky prosím autorku o objasnění motivů, jež vedly ke vzniku této práce.
2. Zkoumala autorka (resp. plánuje se v budoucnosti zkoumat) i interakce minerálních vrstev s větším počtem organických molekul? Takto by se daly získat o vzájemné interakci organických molekul na minerální vrstvě během adsorpčního procesu a kinetice adsorpce.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha 9.5. 2012

