

Posudek práce

předložené na Přírodovědecké fakultě JU

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: 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/oponenta: RNDr. Milan Předota, Ph.D.

Pracoviště: Ústav fyziky a biofyziky PřF JU

Kontaktní e-mail: predota@prf.jcu.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:

Téma práce bylo zvoleno s ohledem na dlouhodobou vědeckou činnost školitele v oblasti studia rozhraní pevná látka/kapalina. Konkrétně se jedná o studium interakcí molekul představujících významné funkční skupiny huminových kyselin s různě nabitými křemennými povrchy, které odpovídají různým hodnotám pH prostředí. Tento výzkum je součástí projektu "Studium struktury a dynamiky minerálních povrchů a biomembrán a jejich interakcí s organickými a anorganickými ligandy pomocí počítačového modelování", MŠMT - Kontakt, ME 09062.

Počátečními vstupy bakalářské práce byly konfigurace a topologie povrchu a studovaných molekul dodané členy týmu školitele (ing. Kroutil, dr. Chval, dr. Minofar), přičemž některé finální vstupy byly dodány až v průběhu podzimu 2011 a tato bakalářská práce představuje jejich první použití. Úkolem studentky bylo z těchto komponent připravit, nasimulovat a zanalyzovat řadu studovaných systémů dle postupů podrobně zdokumentovaných v bakalářské práci. V oblasti simulace interakce molekul s rovinnými povrchy za použití softwaru GROMACS se jednalo o ojedinělou studii, což představovalo zvýšené požadavky na tvořivost studentky, experimentování s použitím řady příkazů a jejich možností a zvolení nejvhodnějších. Tento úkol nejen úspěšně zvládla pro potřeby vlastní práce, ale jí podrobně zdokumentovaný postup přípravy systémů a analýzy výsledků představuje výborný tutoriál pro provádění simulací obdobných systémů.

Studentka prokázala, že je schopna se rychle seznámit s pro ni dosud neznámým oborem, počítačovými simulacemi, pracovat v operačním systému Linux na vzdálených výpočetních klastrech, spouštět paralelní úlohy přímo i pomocí frontových systémů, zobrazovat molekulární struktury, analyzovat, prezentovat a diskutovat výsledky. Část výsledků získaných při řešení této bakalářské práce byla prezentována na konferenci a bude použita ve vědecké publikaci. Po celou dobu řešení bakalářské práce studentka prokázala nadstandardní pracovitost, která se projevila i na dosažených výsledcích a kvalitě bakalářské práce – která dle mého přesvědčení spíše odpovídá požadavkům kladeným na magisterskou diplomovou práci.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**Práci** doporučuji nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm: výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

České Budějovice, 15. 5. 2012

