

Přírodovědecká
fakulta
Faculty
of Science

Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích
University of South Bohemia
in České Budějovice

POSUDEK OPONENTA NA BAKALÁŘSKOU PRÁCI

Autor práce: Tomáš Mácha

Název práce: Vliv hydratace na geometrii aniontů kyseliny trihydrogenfosforečné

Školitel práce: doc. Mgr. Martin Kabeláč, Ph.D.

Oponent práce: Mgr. Michal Kutý, Ph.D.

Pracoviště opONENTA: Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích

	Bodový rozsah hodnocení ¹	Body
(1) FORMÁLNÍ POŽADAVKY		
Celkový rozsah práce (pro bakalářské práce min. 18 stran, pro diplomové práce min. 25 stran), vyváženost rozsahů jednotlivých částí, logická struktura práce (u experimentálních prací doporučení pro teoretickou část do 1/3 celkového rozsahu)	0-3	2
Kvalita literární rešerše (počet použitých původních pramenných zdrojů, vhodnost výběru, aktuálnost zdrojů)	0-3	1
Správnost používání citačních odkazů (přítomnost necitovaných údajů, dodržování jednotného stylu citací, používání oficiálních zkratk časopisů)	0-3	2
Grafická úprava textu a obrázků	0-3	2
Úroveň souhrnu/anotace (i v angličtině)	0-3	2
Jazyková a stylistická úroveň, respektování platného názvosloví	0-3	0

¹ Bodový rozsah hodnocení: 0-nevyhovující, 1-vyhovující, 2-průměrné, 3-excelentní. U teoretických prací hodnotíte jenom (1) Formální požadavky, u experimentálních prací i (2) Věcné požadavky a u prací v cizím jazyce i (3) Jazykovou úroveň práce v cizím jazyce.

Správnost a úplnost popisů u obrázků a tabulek (srozumitelnost bez zřetele k ostatnímu textu, vysvětlení značek, jednotky uváděných veličin)	0-3	2
Formální požadavky – body celkem		11

(2) VĚCNÉ POŽADAVKY

Splnění cílů práce	0-3	3
Schopnost porozumět výsledkům, jejich interpretace a jasný popis, srozumitelnost diskuze a závěrů	0-3	2
Úroveň diskuse – interpretace výsledků, zařazení do kontextu v literatuře (absence diskuse výsledků s literaturou je nepřijatelná)	0-3	2
Logika postupu při vlastní výzkumné práci	0-3	2
Úplnost popisu použitých metodik	0-3	2
Experimentální náročnost práce, samostatnost při práci	0-3	2
Úroveň zpracování experimentálních dat	0-3	2
Aktuálnost použitých metod	0-3	3
Přínos práce pro obor a publikovatelnost výsledků (po případném doplnění)	0-3	3
Věcné požadavky u experimentálních prací – body celkem		21

(3) PRÁCE V CIZÍM JAZYCE

Jazyková a stylistická úroveň	0-3
--------------------------------------	-----

CELKEM BODŮ (MAX/ZISKANÝCH)	48/51²	32
------------------------------------	--------------------------	-----------

Komentář oponenta:

Autor bakalářské práce se zabýval kvantově-chemickou studií na molekulách aniontů kyseliny fosforečné ve vakuu a ve vodném prostředí za účelem reparametrizace těchto iontů v silovém poli Amber.

Práce v celkovém rozsahu 60 stran je členěna standardně, nicméně s nepříliš vyváženým rozsahem kapitol. V kapitole „Odbočná rešerše“ je zbytečně velký prostor

² Vyberte jednu z hodnot: 48 bodů pro experimentální práce, 51 bodů pro experimentální práce v cizím jazyce

(asi 4 strany) věnován historii, vlastnostem a výrobě elementárního fosforu, který není předmětem bakalářské práce. Mnohem cennější by byly aktuální informace o struktuře fosfátového iontu ve vakuu a vodním prostředí, což se sporadicky diskutuje až v rámci diskuze v závěrečné části práce v kapitole Výsledky. V první kapitole se vyskytuje řada gramatických i faktických chyb, které významně narušují čtivost i srozumitelnost textu, navíc, na několika místech text nemá charakter odborné rešerše, viz například kapitola o červeném fosforu. Na straně 5 se vyskytuje chyba v chemické rovnici autoprotolýzy kyseliny fosforečné, navíc, zde i na jiných místech je používán nesprávný symbol pro rovnovážnou šipku. Na straně 8 v kapitole o výrobě kyseliny trihydrogenfosforečné jsou chyby v chemické rovnici číslo 7 a 8 a na stejné straně 8 v kapitole o využití kyseliny fosforečné je uveden nesprávný chemický vzorec hydrogenfosforečnanu i dihydrogenfosforečnanu vápenatého. Navíc, v chemických vzorcích je nesprávně používán symbol hvězda pro krystalickou vodu a v matematických výrazech je tento symbol používán jako operace násobení.

Následující kapitola „Teoretický úvod“ v rozsahu 12 stran popisuje jednotlivé výpočetní *ab initio* kvantově chemické metody na úrovni Hartreeho-Focka, Mollerova-Plessetova perturbační teorie, metody vázaných klastrů a hustotního funkcionálu. Teoretický popis uvedených metod je poměrně náročný úkol, nicméně autor se úkolu zhostil úspěšně a text je napsán více či méně srozumitelně. V rámci problematiky o bázi atomových orbitalů jsou popsány orbitály Slaterova typu STO a Gaussova typu GTO, překvapivě však nejsou vůbec zmíněny polarizační a difúzní funkce, i když právě tyto báze byly použity v experimentální práci.

Experimentální část v páté kapitole v rozsahu necelých tří stran obsahuje cíle práce a popis metodiky. Stručnost popisu cílů práce však postrádá zdůvodnění skenování povrchů potenciální energie pro následnou reparametrizaci iontů pro silové pole. K popisu a výběru metodiky práce nemám připomínky, nicméně na straně 25 je vhodné objasnit smysl uvedené vibrační analýzy pro zoptimalizované molekuly.

V následující kapitole v rozsahu 26 stran jsou popsány dosažené výsledky studia vlivu báze a prostředí na geometrii molekul fosfátů a studia stability konformerů na základě jednodimenzionálního či dvoudimenzionálního skenování povrchu potenciální energie.

Výsledky jsou provázeny obrázky molekul, poměrně přehlednými tabulkami geometrie molekul a jejich energií. Vypočítaná strukturní data byla porovnávána s podobnými publikovanými studiemi jiných autorů. V bibliografické části je uvedeno 35 citací, přičemž několik citací (2, 3, 4, 5, 9 atd.) se odkazuje na internetové stránky, přestože by se jistě daly vyhledat v původních ověřených zdrojích.

Připomínky a dotazy, na které má student/-ka reagovat při obhajobě.

1. Vzhledem k tomu, že na studovaném systému již v minulosti byly prováděny obdobné výpočty i na vyšší výpočetní úrovni, prosím o stručné shrnutí přínosu autorovy studie pro popis vlastností uvedených fosfátů.
2. Vzhledem k tomu, že bakalářská práce by měla sloužit i jako studijní materiál pro začínající studenty v oboru, bylo by velmi vhodné uvést alespoň na jednom příkladu, jakým způsobem byla zadávána strukturní data, vstupní parametry výpočtu a jak vypadá výstupní protokol o výpočtu.
3. V práci byla často zmiňována a také aplikována metoda hustotního funkcionálu (DFT), prosím o srozumitelné vysvětlení pojmu funkcionál.
4. Cíle práce obsahují informaci, že smyslem studie je následná reparametrizace iontů v silovém poli Amber. Prosím o zdůvodnění reparametrizace.
5. Vzhledem k výpočetní náročnosti studovaného systému je hodné zmínit i časovou náročnost jednotlivých výpočtů a taktéž by bylo žádoucí a vhodné uvést použitý výpočetní hardware, zejména pokud byly použity kapacity výpočetní organizace MetaCentra...

Chyby, na které si má dávat student v budoucnu pozor:

Pro jednoznačnost a srozumitelnost textu je v budoucnu vhodné se více věnovat formální stránce textu, a také detailnímu a srozumitelnějšímu popisu metodiky práce.

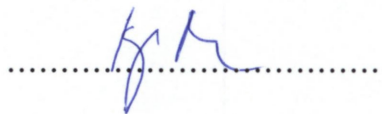
Závěr:

Autor práce se seznámil s řadou náročných výpočetních metod kvantové chemie a molekulového modelování a aplikoval je na jednoduchý anorganický molekulární systém. Přestože uvedená práce obsahuje řadu formálních chyb, byly dosaženy výsledky, které mohou poskytnout podklady pro zmíněnou reparametrizaci studovaného systému silového pole Amber.

Práci d o p o r u č u j i k obhajobě a navrhuji známku dobře .³

³ Je možné navrhnout známku s tím, že navržená známka může být upravená při obhajobě (pokud se oponent nezúčastní obhajoby, v posudku navržená známka se do výsledné známky nezapočítává). Známky: výborně (1),

V Českých Budějovicích dne 16.1.2019



podpis