

HODNOCENÍ ZÁVĚREČNÉ KVALIFIKAČNÍ PRÁCE
POSUDEK VEDOUcíHO

Autor závěrečné práce: Petr Myslík

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

Název práce: Komplexace anilidů atomy bromu

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

Komentáře či připomínky:

Předložená práce Petra Myslíka se zabývá výpočty energií a struktur několika konformerů N-[3,5-bis(trifluoromethyl)fenyl]-2-kyanoacetamidu samostatně a v komplexu s atomem bromu. Student předkládá ucelený text, kde popisuje použité metody, software, a následně i detaily strukturní optimalizace a dalších navazujících výpočtů vlastností molekul a komplexů. Kde to lze, jsou získaná data srovnávána s publikací MÜLLEROVÁ et al., Supramolecular Chemistry 28, 249 (2016). Autor dosahuje dobré shody s výsledky publikovanými v této práci a v případě rozdílů jsou tyto diskutovány a je předloženo vysvětlení. Student pracoval samostatně a získal množství kompetencí, které v jeho studijním oboru nejsou běžné, např. provádění vzdálených výpočtů na výpočetních clusterech, dávkové zpracování dat, využití skriptů k získávání a vizualizaci dat z výstupních souborů simulací, vizualizaci molekul, práce v textovém režimu v prostředí operačního systému Linux, atd. Nadto se musel zabývat teoretickými aspekty a metodikou výpočtů. Proto se nelze divit, že popis všech těchto aspektů jeho práce není vždy zcela správný, a to zejména v oblasti teoretického pozadí výpočtů. Nicméně, se zohledněním toho, že takřka všechny pojmy byly pro studenta nové a také toho, že práce se dostala do finální podoby bez přečtení vedoucím práce, považuji výsledný text velmi dobrý.

Celkové zhodnocení:

Práce splňuje zadání. Po formální stránce jsou splněny náležitosti požadované fakultou. Oceňuji studentovu samostatnost a schopnost učit se v celém průběhu práce na tomto tématu. Doporučuji práci hodnotit stupněm Velmi dobře.

Otázky k obhajobě:

1. Vysvětlíte, co je to přesně B3LYP, který v textu nazýváte metodou.
2. V sekci 3.3 se věnujete hledání přechodného stavu (sedlového bodu v energii) a konstatujete, že tento se nachází na spojnici mezi dvěma (lokálně) stabilními konfiguracemi. Proč tomu tak nemusí být a dokázal byste najít příklad, kdy se sedlový bod nenachází na takové spojnici?
3. Jmenujte jednu rozšířenou metodu pro hledání přechodného stavu, která počítá se znalostí rovnovážných konfigurací na obou stranách hledaného sedlového bodu.

Kontrola plagiátů:

Míra shody podle STAG: max. 5%

Komentář v případě shody nad 5 %: Podobné části textu jsou řádně citovány.

Celková klasifikace a doporučení k obhajobě:

Práce splňuje požadavky na udělení akademického titulu, a proto ji doporučuji k obhajobě
Navrhuji tuto práci klasifikovat stupněm: Velmi dobře (2)

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

V Liberci

dne 25.1.2022



.....
Podpis vedoucího práce