

Hodnocení vedoucího práce k bakalářské práci Milana Kočí

Předložená bakalářská práce nese název „Predikce krystalových struktur“. Toto téma zažívá v současnosti velký rozvoj, který byl podmíněn nárůstem výpočetní síly počítačů v posledních letech. Kromě samotné struktury lze predikovat i její vlastnosti a její stabilitu za externích podmínek, což je snad sen každého materiálového vědce.

Zadání bakalářské práce nebylo koncipováno na splnění jednoho konkrétního úkolu, ale vedlo studenta k získávání přehledu o základních principech a metodikách při predikování krystalových struktur s cílem mu dát dobrý široký základ pro další studium. Úkol studenta byl o to těžší, že i pro vedoucího je toto téma poměrně nové a ani v celé České Republice není ucelená skupina, která by se, dle mých vědomostí, tomuto tématu aktivně věnovala.

Milan Kočí projevoval od počátku aktivní zájem o danou problematiku a aktivně se na dané problematice začal věnovat již v září minulého roku před začátkem akademického roku. Základní myšlenka predikce struktury jednoduché molekuly, byla na studentovu žádost rozšířena i o experimentální určení struktury z difrakčních dat polykrystalického vzorku. Od té doby se dané problematice velmi aktivně a úspěšně věnuje. Během vánočních prázdnin např. zvládl kapitolu predikce uspořádání ve slitině Fe_3Al . Nezaháel ani během zkouškového období, kdy přečetl téměř celou mnohaset stránkovou knihu o difrakci (Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials – Vitalij K. Pecharsky). Koncem srpna se aktivně zúčastnil sedmidenní mezinárodní krystalografické konference IUCR-2021. Prezentoval zde poster s názvem: „CSP: Paracetamol via Grid Search & PSO“.

Své programovací dovednosti prokázal úspěšnou implementací třech různých algoritmů pro globální optimalizaci v jazyce Pearl: Simulované žíhání, genetický algoritmus a optimalizace hejnem částic. Ze strukturního pohledu se věnoval jak anorganickým, tak organickým krystalickým strukturám. Na struktuře Paracetamolu si vyzkoušel poměrně komplexní proces predikování krystalické struktury. Kromě počítačových simulací získal i praktické zkušenosti s experimentálním měřením na rtg difraktometru.

Milan Kočí je ochotný, pracovitý a schopný a nezbývá mi než konstatovat, že mi bylo velkým potěšením s ním spolupracovat. Odevzdaná bakalářská práce je na velmi vysoké úrovni a hodnotím jí kvalifikační stupněm A.

V Praze dne 7. září 2021

Ing. Jan Drahokoupil, Ph.D.