

Posudek oponenta na bakalářskou práci

Název práce: Predikce krystalových struktur

Student: Milan Kočí

Pracoviště: Katedra inženýrství pevných látek, FJFI, ČVUT

Má práce experimentální charakter: Ano
Odborná úroveň práce: A
Textová úroveň práce: B
Grafická úroveň práce: A
Rozsah: A
Literatura: A

Připomínky do diskuze a dotazy:

Bakalářská práce Milana Kočího se zabývá metodami predikce krystalových struktur pevných látek, jak po teoretické, tak po praktické stránce. Celkový rozsah práce včetně citací a příloh je 78 stran.

Teoretická část práce v rozsahu cca 30 stran shrnuje jednak základy metod pro řešení krystalových struktur z práškových difrakčních dat, z větší části se pak věnuje metodám výpočtu energie krystalické struktury, a to jak metodám založeným na klasické Newtonovské mechanice, tak i metodám kvantově-mechanickým, jako jsou metody DFT. Jedna kapitola této části je též věnována popisu algoritmů metod globální optimalizace, a na závěr této části jsou shrnuty funkce jednotlivých modulů programu Materials Studio, použitých následně v praktické části. Jedná se tedy o poměrně rozsáhlou problematiku, která je nicméně podána přehledně a srozumitelně, citovaná literatura je relevantní, což vše svědčí o tom, že se Milan Kočí v diskutovaných tématech dobře orientuje. Práce tak může sloužit i dalším studentům pro seznámení s tématem.

Zdařilá je rovněž druhá, praktická část práce, v rozsahu cca 20 stran. V této části Milan Kočí úspěšně aplikoval představené metody na predikci krystalových struktur tří látek, a to NaCl, Fe₃Al, a paracetamolu. První úlohou bylo řešení krystalové struktury z namodelovaných, posléze však i z experimentálně naměřených rentgenových difrakčních dat pro paracetamol. Další úlohou pak bylo pro všechny tři látky predikovat jejich krystalovou strukturu na základě minimalizace energie počátečního souboru modelů dané struktury. V této části byly vyzkoušeny různé metody globální optimalizace, jakož i metody konformační analýzy organických molekul a analýza podobnosti předpovězených struktur na základě hierarchického shlukování. Milan Kočí všechny zmíněné metody zvládl, postup je výpočtů je popsán srozumitelně a jím předpovězené struktury se shodují se strukturami dříve publikovanými.

Několik málo výhrad k této jinak obsahově i graficky kvalitní práci se týká její jazykové a formální stránky. V první řadě chybí seznam zkratk a použitých symbolů. Dále text na několika místech sklouzává k použití hovorových nebo neobratných výrazů, (konzultant sehnal prášek paracetamolu, vypočetli jsme si energii, na obrázku si lze prohlédnout, shlukování nám řeklo, apod.), dále pak chybí čárky v souvětích a objevují se chyby ve shodě podmětu s přísudkem (struktury zkonvergovali, permutace probíhali, body pokračovali apod.).

Přes uvedené nedostatky považuji práci za velmi dobrou a doporučuji ji k obhajobě s hodnocením A.

Na závěr bych ráda položila dva dotazy:

1. Z textu práce není jasné, nakolik se Milan Kočí podílel na tvorbě skriptů uvedených v příloze, mohl by tuto okolnost objasnit?
2. V závěru práce je naznačen budoucí směr bádání, zaměřený na nalezení vhodných parametrů pro algoritmy globální optimalizace. Mohl by student tuto úvahu rozvést? V čem spočívají výhody a nevýhody jednotlivých algoritmů, případně jak souvisí s druhem studované látky?

Práci doporučuji k obhajobě: Ano

Návrh hodnocení: A

Oponent: RNDr. Lada Biedermannová, PhD
Biotechnologický ústav AV ČR

V Praze, 28.8.2021

.....
podpis

