

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

posudek vedoucího
 bakalářské práce

posudek oponenta
 diplomové práce

Autor: Bc. Radek Novotný

Název práce: Molecular simulations of organic-inorganic hybrid materials

Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly vedoucího: doc. RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.

Pracoviště: KCHFO

Kontaktní e-mail: pospasil@karlov.mff.cuni.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:

Cílem předložené diplomové práce pana Novotného bylo teoreticky popsat a seznámit se s použitím termostatů a barostatů v rámci molekulárních simulací a následně aplikovat různé simulační postupy pro řešení interkalované struktury podvojných hydroxidů (LDH) molekulou atorvastatinu, látkou sloužící k blokadě tvorby cholesterolu v organismu. Požadovanou vlastností výsledného materiálu je možnost řízeného postupného uvolňování atorvastatinu z mezivrstev LDH.

Teoretická část práce byla velmi podrobně a věcně zpracována ať už se týká LDH, atorvastatinu, detailních témat molekulárních simulací, tak použitých experimentálních metod rentgenové difrakce a numerické magnetické rezonance. Provedenou rešerši považuji za dobře zpracovanou včetně na konci uvedených seznamů pro publikace, obrázky, tabulky a zkratky.

Druhá, praktická výpočetní část, popisuje detailní postupy molekulárních simulací včetně uvedení nastavení použitých v programu Materials Studio v rámci diplomové práce pro řešení interkalovaných struktur atorvastatinu pro různé koncentrace odpovídající připraveným vzorkům. Molekula atorvastatinu byla optimalizována a manuálně vložena v různých pozicích a nastaveních do mezivrstev s cílem spočítat nejvhodnější uspořádání molekul atorvastatinu v LDH pro tři různé známé koncentrace.

Parametry optimalizovaných finálních modelů interkalátů byly použity pro srovnání s experimentálně změřenými hodnotami. Výsledky ukázaly i přes volbu variabilních parametrů velmi dobrou shodu s experimentem a velkou stabilitu prezentovaných výsledných spočtených modelů a jejich možné použití pro interpretaci a doplnění experimentálních výsledků. Rovněž ukázaly cestu pro následné modifikace používaných parametrů a další možná vylepšení pro plánované publikování výsledků výpočtů pro různé koncentrace atorvastatinu v mezivrstev LDH.

Pozitivně hodnotím, že autor práce velmi dobře zvládl teoretické základy molekulárních simulací se zaměřením na popsání oblasti využití termostatů a barostatů a dále v průběhu výpočtů interkalovaných LDH struktur s atorvastatinem prokázal velmi aktivní a samostatný přístup. A to jak při zpracování teoretické části tak při výpočtech a řešení modelových a pravděpodobných struktur. Vybrané výsledky jsou částečně zahrnuty v jedné, již odeslané publikaci do časopisu Applied Clay Science, tj. výsledky výpočtů nejvyšší koncentrace atorvastatinu v LDH a v druhé připravované publikaci budou právě porovnány různé koncentrace atorvastatinu v mezivrstev LDH z výpočetního hlediska.

K obhajobě předložená diplomová práce po formální stránce, svým obsahem i rozsahem plně splňuje podmínky kladené na diplomové práce a dávám tímto své doporučení k její obhajobě.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Praha, 5. 9. 2022

Místo, datum a podpis vedoucího: