

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

posudek vedoucího  posudek oponenta  
 bakalářské práce  diplomové práce

Autor/ka: *Radek Novotný*

Název práce: *Molecular simulations of organic-inorganic hybrid materials*

Studijní program a obor: *Biofyzika a chemická fyzika, Chemická*

Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly oponenta: *Ing. Jan Drahekoupil Ph.D.*

Pracoviště: *Fyzikální ústav AV ČR*

Kontaktní e-mail: *draho@fzu.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/oponenta:

Předložená práce je napsána v anglickém jazyce, je přehledná a velmi dobře srozumitelná. Tematicky se věnuje molekulární dynamice interkalované struktury podvojných hydroxidů organickou molekulou. Zdařilá rešeršní část svědčí o přehledu autora. Teoretická část práce se velmi podrobně věnuje molekulárním simulacím, které jsou pak hlavním praktickým nástrojem ve výsledkové části. Nezanedbatelná část práce je věnovaná také popisu termostatů a barostatů. Autor srovnává výsledky svých simulací s experimentálními daty práškové rentgenové difrakce a pevnolátkové nukleární magnetické resonance. Výsledky těchto experimentálních metod jsou převzaté. V teoretické části je těmto dvou metodám věnován vhodný prostor. Z mého pohledu je teoretická část věnovaná rtg difrakci hodně o základních principech a trochu mi tam chybí detailnější popis práškové difrakce s ohledem na prezentovaná difrakční data. Ale je jasné, že v rámci DP není na vše prostor. Tak tuto mou připomínku berte spíše jako doporučení pro další studium. Výsledková část, i když je rozsahově menší (13 stran) než úvodní teoretická část, za ní co do kvality nezaostává a svědčí o promyšleném postupu při řešení dané problematiky.

Odborná úroveň je práce je na velmi dobré úrovni, téma je aktuální, nenašel jsem v práci žádné věcné chyby a tiskových chyb velmi poskromnu. Celkově bych práce hodnotil kvalifikačním stupněm někde mezi velmi dobře až výborně. Ale abych mohl ocenit i jiné vynikající práce hodnotím tuto kvalifikačním stupněm velmi dobře.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

- 1) Nezkoušel jste predikovat MMR data pro vámi předpovězené struktury? Např. pomocí modulu CASTEP v Materials Studiu.
- 2) Jaké byly energetické rozdíly mezi nejlepšími konformery atorvastationu? Nemohl by být i jiný konformer stabilní v rámci LDH struktury?
- 3) Jaká je přesnost určení mezivínné vzdálenosti  $d_{003}$  z difraktogramu na obr 5.8?
- 4) Pozice difrakční maxim pro naměřené a nasimulovaná spektra na obr. 5.8 sedí pouze pro první pík. Jak si vysvětlujete nesouhlas na dalších maximech?

## Náměty

- a) Pozadí na obrázku 5.8 je hodně veliké a velmi stěžuje přesné stanovení polohy difrakčního maxima. Jaká byla použita optika u difrakčních měření? Pokud to již nebylo použito, mohl by pomoci paralelní svazek (či menší clonky u divergentního svazku) a tzv. „beam knife“.
- b) Pro lepší shodu mezi naměřeným a napočteným difrakčním záznamem by se do simulací mohlo započítat rozšíření difrakční maxim. Ať už způsobené malou velikostí krystalitů či fluktuacemi mezivínných vzdáleností.

## Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

## Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: Praha, 8.9.2022