

Posudek školitele bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: **Jakub Krieger**

Název práce: **Molekulová simulace Lennard-Jonesovské tekutiny jako úloha do praktika z fyzikální chemie**

Hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte známkou ve standardní stupnici 1 až 4)

1. Samostatnost a spolupráce uchazeče/ky	
a) Ve fázi zpřesňování tématu práce	1
b) Během zpracování zadaného tématu	1
c) Při sepisování práce	1
2. Komunikativnost	1
3. Zájem o práci a pracovní nasazení uchazeče/ky	1
4. Spolehlivost a plnění zadaných úkolů	1
5. Celková úroveň zpracování práce	1

Případný slovní komentář k výše uvedeným bodům:

Jakub velmi aktivně spolupracoval ve všech fázích práce. Iniciativně přicházel s vlastními návrhy, které následně implementoval po konzultaci se školitelem.

Stanovisko k opravě chyb v práci:

opravný lístek/oprava v textu **NENÍ** (zakroužkujte) podmínkou přijetí práce

Komentář: nevím, jak se dá něco zakroužkovat v docx formuláři.

Stanovisko k výsledku automatické anti-plagiátorské kontroly práce dle SIS:

Celkové procento podobnosti: viz SIS

Počet slov v nejdelším úseku podobnosti: viz SIS

Slovní komentář ke stavu kontroly programem Turnitin ze SIS (*byla nalezena významná shoda v části úvod, výsledky, diskuse či závěr?*):

Jde o práci na zcela originální téma, která ze samotné povahy věci jen těžko může být plagiátem. Automaticky nalezená shoda se týká pouze ustálených termínů, odkazů na literaturu, případně jiných náhodných shluků slov.

Jedná se podle Vás o **ORIGINÁL** (zakroužkujte) - v případě podezření, že posuzovaná práce je plagiát, prosím zdůvodněte

Slovní komentář k práci:

Molekulové simulace jsou relativně mladým vědným oborem na pomezí chemie a fyziky, který má v současnosti nezastupitelné místo ve vědeckém výzkumu. Vedle teorie a experimentu tvoří

simulace třetí samostatný pilíř moderní chemické a fyzikální vědy. Tento význam simulací kontrastuje s tím, že jejich výuka probíhá pouze v rámci specializovaných kurzů určených pro pokročilé studenty magisterského nebo vyššího stupně studia. Jakubovým úkolem bylo přiblížit svět molekulových simulací studentům bakalářského studia tím, že připraví vhodnou úlohu pro praktikum z fyzikální chemie.

Během práce na svém bakalářském projektu si Jakub rozšířil znalosti ze statistické termodynamiky a doplnil si specializované znalosti z molekulových simulací a programování. Tyto nově získané znalosti pak propojil s teorií i praktickými zkušenostmi z didaktiky chemie a fyziky. Díky tomu vznikla během několika měsíců úloha, kterou lze v následujícím akademickém roce použít ve výuce bakalářského programu fyzikální chemie. Tento výsledek považuji za úspěch, který výrazně přesahuje běžná očekávání ohledně výstupů bakalářské práce.

Celkový návrh

Navrhovaná celková klasifikace (*výborně, velmi dobře, dobře, neprospěl*): **výborně**

Datum vypracování posudku: 6.6.2024

Jméno a příjmení, podpis školitele (*dle SIS*):

RNDr. Peter Košovan, PhD

