

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Stanislav Sláčík

Název práce: **Charakterizace strukturních parametrů rozhraní mezi Langmuirovou monovrstvou mastných kyselin a povrchem vody na základě molekulových simulací**

Studijní program a obor: Fyzika – Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly vedoucího/**oponenta**: RNDr. Ivan Barvík, PhD

Pracoviště: Fyzikální Ústav MFF UK

Kontaktní e-mail: ibarvik@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/oponenta:

Předkládaná práce sestává z 29 stran anglicky psaného textu. Autor nás nejprve seznamuje se zkoumaným systémem – Langmuirovu monovrstvu mastných kyselin. Poté jsou přehledně popsány základní algoritmy užívané v oblasti molekulárně-dynamických simulací atomárních systémů a technické detaily vlastních výpočtů provedených prostřednictvím softwarového balíku GROMACS. Poté následuje přehled výsledků vlastních MD simulací a jejich velmi pečlivá kvantitativní analýza.

MD simulace monovrstvy kyseliny palmitové a 1-hexadekanolu na rozhraní voda-vzduch ukázaly, že prostřednictvím silového pole OPLS je možno získat výsledky, které jsou v souladu s dostupnou literaturou. Působivé jsou zejména MD simulace, kdy při nízké hustotě molekul kyseliny palmitové dochází ke vzniku pórů.

Autor prokázal, že je schopen samostatně provádět MD simulace molekulárních systémů. Pokud bude v rámci případné diplomové práce pokračovat ve směru, který naznačuje v závěru své Bc. práce (zkoumání dynamiky molekul vody v blízkosti monovrstvy s aplikacemi jako mrznutí částic aerosolu obalených organickými molekulami), může velmi brzy získat originální výsledky publikovatelné v impaktovaném časopise.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

V čem spočívá metoda RESP pro určování parciálních nábojů na atomech ?
Proč se při tom používá báze 6-31G* ?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: Praha, 9.6.2011