

Posudek vedoucího bakalářské práce

(EXPERIMENTÁLNÍ PRÁCE)

Příjmení a jméno studenta:	Kolaříková Alena
Studijní program:	Chemie a technologie materiálů
Studijní obor:	Polymerní materiály a technologie
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	UIP
Vedoucí bakalářské práce:	RNDr. Kutálková Eva, Ph.D.
Akademický rok:	2018/2019

Název bakalářské práce:

Studium interakcí hyaluronan-hyaluronan metodou molekulové dynamiky
(virtuální experiment)

Hodnocení bakalářské práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Aktuálnost použité literatury	A - výborně
2. Využití poznatků z literatury	A - výborně
3. Zpracování teoretické části	A - výborně
4. Popis experimentů a metod řešení	A - výborně
5. Kvalita zpracování výsledků	A - výborně
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	A - výborně
7. Formulace závěrů práce	A - výborně
8. Přístup studenta k bakalářské práci	A - výborně

Předloženou práci **doporučuji** k obhajobě a navrhuji hodnocení

A - výborně

Komentáře k bakalářské práci:

Hlavním cílem předložené bakalářské práce bylo seznámit se s počítačovým modelováním, které se stále častěji používá jako doplněk experimentálních studií. V programu pro molekulovou dynamiku NAMD byly zkoumány interakce dvou řetězců hyaluronanu při teplotě 275 K v závislosti na koncentraci chloridu sodného v okolní vodě. Studentka musela v první řadě zvládnout přípravu vstupních systémů, nastavit vhodné parametry simulací a naučit se výpočetní úlohy zadávat do MetaCentra, kde lze využít výkonných počítačů k paralelním výpočtům na mnoha procesorech. Následně bylo potřeba na základě zobrazení výstupních souborů simulací ve vizualizačním programu VMD navrhnout charakteristiky vhodné pro popis interakce řetězců, tyto charakteristiky z obrovských výstupních souborů získat a výsledky interpretovat.

Alenu Kolaříkovou téma zaujalo a pracovala na něm po celou dobu iniciativně a samostatně. Základy své práce položila už během letní stáže, po níž se zúčastnila interní soutěže SVOČ, kde svoji kategorii vyhrála. O získání nadhledu nad problematikou a schopnosti vytvořit si na základě postupně získaných dílčích informací ucelenou představu o studovaném tématu svědčí přehledné členění práce, kvalifikovaný popis výsledků i erudované závěrečné komentáře. Z formálního hlediska téměř dokonalý a promyšleně koncipovaný text přiměřeně pokrývá všechny body zadání, formulace jsou přesné a výstižné. Zajímavé a originální výsledky by mohly být dobrým základem pro kvalitní publikaci.

Jako celek působí bakalářská práce slečny Aleny Kolaříkové velmi dobrým dojmem a splňuje veškerá kritéria kladená na závěrečnou práci ve studijním oboru Polymerní materiály a technologie.

Předložená práce prošla systémem Theses pro kontrolu plagiátorství a žádná shoda s porovnávanými pracemi nebyla shledána. Práce tedy není plagiátem.

Otázky vedoucího bakalářské práce:

bez otázek

Ve Zlíně dne **29. 05. 2019**

Podpis vedoucího bakalářské práce