

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Název práce: Studium elektronových přeskoků v systému konjugovaných molekul
metodami kvantové mechaniky
Studijní program a obor: Fyzika
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: prof. RNDr. Ing. Jaroslav Burda, DrSc.
Pracoviště: KCHFO
Kontaktní e-mail: burda2karlov.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:

Pan Adam Vavrečka začal pracovat na katedře chemické fyziky a optiky na konci druhého ročníku svého bakalářského studia. Postupně zvládl potřebné nástroje kvantové chemie i molekulárního modelování, které bylo nutno použít k výpočtům různých energetických příspěvků a k analýzám vlnových funkcí studovaných komplexů. Rovněž si osvojil na velmi dobré úrovni i teoretické základy jak kvantově-mechanického tak i molekulárně-mechanického popisu zvolených struktur, a to i přes skutečnost, že tato látka je obsahem studia vyšších ročníků. Úspěšně pronikl i do základů operačního systému Linux, skriptování a jazyku python tak, aby mohl vytvářet další pomocné nástroje a analyzovat výpočty kombinované molekulární dynamiky a nestacionárního řešení Schrödingerovy rovnice, jak jsou naprogramovány v programech MNDO99, Gromacs a spojovacího programu Newton-X.

Jeho úkolem bylo studovat časový vývoj elektronových spekter polyenových molekul od etylénu až po 22-uhlíkovou konjugovanou strukturu dokosaundekaenu v přítomnosti solventu n-hexanu kombinovaným přístupem (QM/MM) aby bylo možno zahrnout vlivu rozpouštědla. Zde kromě klasické molekulární dynamiky jader je řešena v jednotlivých krocích rovněž i úloha stanovení elektronových hladin a vypočítána pravděpodobnost přeskočení mezi nimi Tullyho algoritmem. Adam se díky své iniciativě a pracovitosti zhostil zadané úlohy vynikajícím způsobem. Samostatně provedl i analýzy trajektorií.

Bakalářskou práci sepsal samostatně po nastudování potřebné odborné literatury. Její grafická úprava je na velmi dobré úrovni s minimálním počtem překlepů a jiných formálních chyb.

Na závěr bych chtěl konstatovat, že pan Adam Vavrečka studoval po celou dobu s vynikajícím prospěchem a krom studia molekulárního modelování má na své úrovni i velice hluboké vědomosti v celé oblasti chemické fyziky a biofyziky.

Bakalářskou práci navrhuji klasifikovat jako výbornou.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

V Praze 18.6. 2023

prof. Jaroslav Burda, DrSc.