

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Adam Mendl
Název práce: Výpočty mezimolekulárních interakcí
Studijní program a obor: Fyzika
Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího: Mgr. Jiří Klimeš, Ph.D.
Pracoviště: Katedra chemické fyziky a optiky MFF UK
Kontaktní e-mail: jiri.klimes@matfyz.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:

Ve své práci se pan Mendl zabýval výpočty mezimolekulárních vazebných energií pomocí kvantově-mechanických metod a použitím tzv. multipólové expanze pro přibližný výpočet elektrostatického příspěvku k vazebné energii. Přesné výpočty vazebných energií jsou výpočetně náročné, pro výpočet vazebných energií molekulárních krystalů je jich navíc nutné započítat velké množství. Při zvětšující se vzdálenosti mezi molekulami můžeme ale očekávat, že elektrostatický příspěvek k vazebné energii, tedy na úrovni středního pole, bude možné vypočítat dostatečně přesně pomocí modelu pro elektronovou hustotu. V práci pana Mendla byla použita tzv. distribuovaná multipólová expanze, ve které vypočteme bodový náboj, dipól, kvadrupól a vyšší momenty na všech atomech. Součet všech interakcí mezi momenty na jedné a druhé molekule potom dává vazebnou energii. Ačkoliv je tento přístup koncepčně jednoduchý, ukázala se jeho implementace jako velmi netriviální. Hlavním důvodem byly například lišící se definice a konvence použité v různých člancích a programech. Pan Mendl se s těmito nástrahami vypořádal a implementoval potřebný program k výpočtům pomocí multipólové expanze. Výsledky porovnal s referenčními vazebnými energiemi pro různé systémy, které sám vypočítal a s daty z literatury. V práci porovnal různé způsoby výpočtu hodnot momentů a identifikoval nastavení nutná pro získání jejich spolehlivých hodnot. Ty potom použil pro výpočet elektrostatického příspěvku pro dimery vzaté ze čtyř různých molekulárních krystalů. Pro ně analyzoval konvergenci energie s celkovým momentem multipólové expanze. Jedním ze zajímavých výsledků bylo ukázání toho, že kvantově mechanické výpočty mají problémy s numerickou přesností pro malé hodnoty vazebné energie. Tedy výpočty pomocí multipólové expanze pro vzdálené dimery jsou nejenom mnohem rychlejší, ale také numericky přesnější.

Na řešení pracoval pan Mendl zodpovědně a sám nastudoval a použil řadu metod, jak těch pro výpočet energií mnohoelektronových kvantových systémů, tak hlavně těch pro multipólovou expanzi. Přitom úspěšně překonal řadu obtíží, které vyvstanou při implementaci pokročilých metod. Při práci navíc naprosto samostatně použil další metody, které by mohly být pro daný problém vhodné. Vzhledem k rozsahu práce se v ní občas najde nějaký překlep nebo podobný drobný nedostatek. Nicméně bych rád dodal, že ačkoliv je práce svým rozsahem dlouhá, odpovídá to velkému objemu práce, kterou pan Mendl vykonal.

Práce přinesla řadu cenných výsledků, které, spolu s vyvinutým programem, využijeme pro další práci. Celkově tedy hodnotím práci stupněm výborně.

Práci

- doporučuji
 - nedoporučuji
- uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně
- velmi dobře
- dobře
- neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího:

Praha, 5. 6. 2024