

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Adam Mendl
Název práce: Calculation of Intermolecular Interactions
Studijní program a obor: Fyzika a Fyzika
Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: doc. Ing. Pavel Soldán, Dr.
Pracoviště: KChFO MFF UK
Kontaktní e-mail: pavel.soldan@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 oponenta:

Práce se zabývá metodami výpočtu mezimolekulárních interakcí s cílem otestovat možnosti pro predikci vlastností a struktur molekulárních krystalů. V rámci práce byl vyvinut program pro výpočet koeficientů multipólového rozvoje z matic hustoty a pro určení elektrostatického příspěvku k mezimolekulární energii. Tento program byl otestován na dimerech vybraných molekul a příslušných molekulových krystalech.

Rozsah této práce je nadstandardní, částečně kvůli zahrnutí obecného úvodu k použitým kvantově chemickým metodám. Věcných i tiskových chyb je v tak rozsáhlé práci přiměřený počet. Grafickou, jazykovou a formální úroveň považuji za velmi dobrou. Práce obsahuje jak původní, tak převzaté výsledky. Je zřejmé, že student odvedl obrovský kus práce jak v teoretické části (zejména sjednocení používaných definic a značení z různých zdrojů považuji za vysoce netriviální), tak v praktické části (donutit všechny programy, aby spolu „komunikovaly“ muselo být velmi náročné; jsem si také jist, že pokud by autor prezentoval všechny své výsledky, tak by se rozsah této části nejméně zdvojnásobil). Tuto práci proto doporučuji uznat jako **bakalářskou práci** a ohodnotit stupněm **výborně**.

Připomínky (triviální překlepy nejsou uvedeny):

- Chybí citace na „counterpoise correction“ metodu.
- Ve velké části podkapitoly 3.3 jsou nesprávné indexy (místo l_1 je tam l_2).
- Pod rovnicí (3.3) jsou použity nedefinované symboly $U^{(1)}$ a $U^{(2)}$.
- „Přeškálování“ osy y nad obrázky (např. 4.3 nebo 4.16) je snadno přehlédnutelné a tudíž popis této osy může být velmi zavádějící.
- V Bibliography není sjednocené psaní velkých písmen v názvech časopisů.
- Reference [88] není úplná.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Otázky k zodpovězení:

- Rovnice (2.11) a následně první část rovnice (2.13) jsou špatně. Uveďte to prosím na pravou míru.
- Vysvětlení ke druhé rovnici ve (2.12), které je uvedeno v poznámce 3, je nesprávné. Uveďte to prosím na pravou míru.
- Dovysvětlete prosím definici izomorfismu mezi $SU(2)$ a jednotkovými kvaterniony (3.8). Proč příslušný homomorfismus $SU(2)$ do $SO(3)$ není injektivní?
- Celá metoda je řetězcem po sobě jdoucích kroků. Jaká celková přesnost byla požadována? Jak tato přesnost byla udržována v jednotlivých krocích?
- Co si mám představit pod pojmy „noisy data/calculations/datasets“ (str. 39), které byly rozhodující pro volbu optimalizačního algoritmu?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta:

v Praze 7.6.2024