

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího  
 bakalářské práce
- posudek oponenta  
 diplomové práce

Autor/ka: Tomáš Grycz  
Název práce: Dynamické simulace a výpočty elektronových spřažení pro interpretaci ultrarychlé spektroskopie excitovaných Re komplexů  
Studijní program a obor: Fyzika  
Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: Ing. Stanislav Záliš, CSc.  
Pracoviště: Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského  
Kontaktní e-mail: stanislav.zalis@jh-inst.cas.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:

V práci jsou studovány donor-akceptorové komplexy obsahující Re komplex, na jehož bipyridinovém ligandu je navázán imidový ligand. V práci jsou metodami kvantové chemie a molekulární dynamiky charakterizovány dva různé Re komplexy v základním a různých excitovaných stavech. Vliv variace imidového ligandu a geometrického uspořádání na rychlost přenosu elektronu byl počítán zobecněnou Mulliken-Hushovou metodou. Kladně hodnotím, že v práci byl zohledněn vliv rozpouštědla na vypočtené charakteristiky a sledován průběh elektrostatického potenciálu generovaného rozpouštědlem. Ke srozumitelnosti práce přispívá přehledný úvodní popis metodiky a shrnutí všech použitých vztahů a přiblížení.

Práce je na vysoké odborné úrovni, použitá metodika je adekvátní bakalářské práci a základní cíle jsou splněny. Na závěr mohu konstatovat, že autor prokázal schopnost samostatné vědecké práce. Nemám připomínky zásadního charakteru a doporučuji bakalářskou práci k obhajobě, navrhuji ji klasifikovat jako výbornou.

## Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Jaké jsou výhody Tamm-Dancoffova přiblížení (TDA) oproti klasické TD DFT?
2. Jaké bylo pořadí MLCT a CS excitovaných stavů získané TDA výpočty, byl nějaký rozdíl mezi vypočtenými energiemi přechodů komplexů A a B? Byla vypočtená spektra porovnána s experimentálními spektry?
3. Při analýze excitovaných stavů v programu Q-Chem byla pro Re atom použita báze LANL2DZ s příslušným pseudopotenciálem, v programu G16 byl použit stuttgartský pseudopotenciál a příslušná báze. Byl pozorován rozdíl v pořadí a složení jednotlivých excitovaných stavů získaných různými přístupy?

## Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

## Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze dne 12. 6. 2024

Stanislav Zálíš