



Věc: Posudek školitele diplomové práce pana Ladislava Bendy „Výpočetní studium struktury a vlastností klastrů ethanolu“

V Praze, 5.5.2006

Těžiště diplomové práce pana Ladislava Bendy leží v kvantově-chemických výpočtech struktury, energie a NMR parametrů různých typů klastrů molekul ethanolu. Výpočty jsou doplněny experimentálním studiem závislosti chemického posunu ^1H hydroxylové skupiny v závislosti na teplotě pro roztoky ethanolu v nepolárním rozpouštědlu (hexanu).

V teoretické části práce diplomant přehledně shrnul podstatné aspekty použitých kvantově chemických metod, základy spektroskopie NMR a též výsledky rešerše na předmětu práce – klastrech ethanolu. Teoretická část je věcně správná, vyvážená a rozsahem odpovídající.

Část popisující vlastní práci diplomanta je rozdělena na kvantově chemické výpočty a měření NMR spekter. Tyto oblasti jsou diskutovány jednak samostatně, jednak je provedena interpretace experimentu za pomoci vypočítaných údajů. Je přesně popsána metodika práce, výsledky jsou přehledně prezentovány a pečlivě diskutovány.

Téma práce bylo motivováno měřeními NMR relaxací jaderných spinů v ethanolu v polymerních roztocích, provedených v naší laboratoři, ve kterých výsledky neodpovídaly „učebnicové“ představě chování malých jednoduchých molekul. Smyslem práce bylo teoreticky prostudovat možnosti asociace molekul ethanolu a její dopad na parametry měřitelné pomocí nukleární magnetické

RNDr. Jan Lang, Ph.D.

telefon: 22191 2602

e-mail: Jan.Lang@mff.cuni.cz

Katedra fyziky nízkých teplot

V Holešovičkách 2, 182 00 Praha 8

telefon: 22191 2565, 22191 2567

fax: 22191 2567

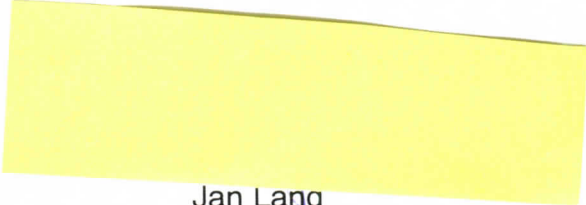
e-mail: mfkfnt@mbox.troja.mff.cuni.cz

rezonance, zejména chemické posuny jader. Tohoto cíle bylo nesporně dosaženo, teoretické výpočty navíc umožnily na molekulární úrovni interpretovat teplotní závislost chemického posunu hydroxylového vodíku.

Práce bude sloužit jako zdroj cenných dat pro vyhodnocení dalších, komplikovanějších experimentů v budoucnosti – např. měření relaxací jaderného spinu, kdy je třeba odhadnout velikost molekulárních klastrů, či je třeba znát rozsah chemických posunů pro jednotlivá jádra a další údaje uvedené v diplomové práci.

Diplomant prokázal, že má hluboké znalosti v oboru kvantově chemických výpočtů. Vedle toho zvládl i experimentální techniku nukleární magnetické rezonance. Dokázal fundovaně propojit výsledky výpočtů i experimentu. K jejich diskusi přistoupil korektně a kriticky. Při řešení projektu diplomant uplatnil samostatný přístup. Výsledky této diplomové práce publikovány v odborném časopise.

Dokončením diplomové práce diplomant nesporně prokázal znalosti a schopnosti odpovídající magisterskému stupni studia na MFF UK v Praze. Doporučuji diplomovou práci k obhajobě a navrhuji klasifikovat ji stupněm výborně.



Jan Lang