

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Bc. Michal Ptáček
Název práce: Theory of ultrafast relaxation and internal conversion in chlorophyll molecules
Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika
Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího: doc. Mgr. Tomáš Mančal, PhD.
Pracoviště: Fyzikální ústav UK, MFF UK
Kontaktní e-mail: mancal@karlov.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:

Práce předložená Bc. Ptáčkem se zabývá rozšířením dnes standardního a velmi úspěšně používaného dvojhladinového modelu chlorofylových a bakteriochlorofylových molekul jako

stavebních kamenů fotosyntetických antén. Téměř veškerá současná znalost funkce fotosyntetických antén je založena na zkoumání kolektivních stavů antén složených z dvojhladinových modelových molekul, které reprezentují pouze základní stav chlorofylu a jeho nejnižší excitovaný stav, tzv. Q_y stav. Tento model je úspěšný zejména kvůli velmi krátké době života vyššího excitovaného stavu Q_x a jeho slabému přechodovému dipólovému momentu. Jelikož se v posledních letech zájem vědecké komunity přesouvá k detailnímu zkoumání vlivu intramolekulárních vibračních stupňů volnosti na přenos energie v anténě, vyvstává i otázka vlivu stavů Q_x na tyto pochody. Navíc se ukazuje, že stavy Q_y a Q_x jsou svázány právě vibračními stupni volnosti a pro plné pochopení spektroskopicky pozorované fotoindukované dynamiky fotosyntetických antén na sub-picosekundové časové škále je třeba tento stav zahrnout. Dosavadní pokusy o rozšířené modelování chlorofylů využívají teoretických postupů, které nejsou dobře kompatibilní se stávající teorií přenosu energie ve fotosyntetických anténách. Formulaci odpovídajícího teoretického modelu, který lze přímočaře zobecnit na fotosyntetické antény předkládá ve své práci Bc. Ptáček. Model zahrnuje explicitní kvantově mechanický popis tří elektronových stavů chlorofylu a malého počtu (zde 1 a 2) intramolekulárních vibračních módů. Elektronové a vybrané vibrační stupně volnosti jsou pak pod vlivem disipační lázně představující vliv ostatních stupňů volnosti molekuly a jejího proteinového okolí. Tato formulace umožňuje parametrizovat nejen molekulu, ale i její prostředí (pomocí tzv. spektrální hustoty) a vypočítat takto např. rychlostní konstanty relaxace energie (interní konverze) mezi stavy Q_x a Q_y , včetně případných změn těchto rychlostních konstant v důsledku interakce s dalšími chlorofyly v anténě. Model je parametrizován srovnáním vypočtených absorpčních spekter s experimentem, což stále poskytuje jistou parametrickou volnost. Tu Bc. Ptáček také zkoumá. Přesnější určení parametrů bude předmětem navazující práce, kde budou provedena srovnání pro vyspělejší spektroskopické metody, včetně časově rozlišených spektroskopii.

Práce je psána velmi slušnou angličtinou a místy je velmi podrobná. Je možno říci, že nebýt striktních termínů odevzdání, mohla být podrobná i v částech, kde podrobná není. Samostatnou implementací a výrazným urychlením výpočtů oproti softwaru poskytnutému školitelem prokázal řešitel schopnost používat potřebnou teorii i dostatečný vhled do jejího fungování pro její nutné rozšíření. Práci považuji za velmi zdařilou s velkým potenciálem pro pokračování a zobecnění a doporučuji ji vřele uznat jako diplomovou.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího:

Praha, 22. 8. 2023, Tomáš Mančal