

Posudek školitele

Robert Sedlák vypracoval na našem oddělení diplomovou práci na téma „Ab initio quantum chemical investigation of phenylacetylene complexes“. Studie je součástí společného projektu s Prof. N.G. Patwari z Indian Institute of Technology, Bombay týkající se určení struktury komplexů aromatických molekul s jednoduchými ligandy. Experimenty v plynné fázi (IR-UV rezonanční spektroskopie) neposlytly dostatečné informace vedoucí k jednoznačnému určení struktury. Kombinace přesných CCSD(T) výpočtů a experimentu dovolila u většiny komplexů úspěšně reprodukovat experimentální údaje a vyřešit strukturu komplexů.

Diplomant provedl řadu kvantověchemických výpočtů na rozdílných úrovních (DFT, MP2, CCSD(T), SAPT) které charakterisovaly povrchy potenciální energie. Vzhledem k tomu, že teplota experimentu není známa bylo nutné zahrnout i vliv entropie. Závěry práce jsou cenné a ukázaly, že strukturu komplexů aromatických molekul s ligandy není možné jednoznačně určit pokusně. Kombinace teorie a experimentu naopak vedla k určení struktury. Diplomant pracoval samostatně a aktivně. Diplomová práce vyústila do sestavení dvou publikací zasláných do do časopisu Journal of Physical Chemistry A. První publikace, kde je RS druhým autorem je již v tisku, ve druhé, kde je diplomant prvním autorem je v recensním řízení.

Diplomová práce je velmi kvalitní a navrhuji ji hodnotiti jako výbornou.

V Praze 25. května 2009



Prof. Ing. Pavel Hobza, DrSc, FRSC