

Školitelský posudek bakalářské práce

pana Daniela Šimsy

na téma

Výpočet energetického rozštěpení mezi singletovým a tripletovým stavem oxyallylového diradikálu pomocí multireferenčních metod spřažených klastrů

Cílem bakalářské práce pana Daniela Šimsy bylo otestovat přesnost multireferenčních metod spřažených klastrů s poruchovým zahrnutím triexcitací vyvinutých v naší skupině. Jako studovaný systém jsme zvolili oxyallylový diradikál, pro jehož singlet-triplet štěpení jsou k dispozici experimentální data z nedávné doby. Z hlediska kvantové chemie se jedná o “obtížný” systém, protože řada standardně používaných metod, jako DFT, ale i CASPT2, zde dává kvalitativně chybný výsledek (tj. opačné energetické pořadí těchto stavů). Výsledky výpočtů provedených panem Šimsou ukazují, že MkCCSD(T) metoda dává singlet-triplet štěpení ve výborné shodě s experimentem.

Bakalářská práce pana Šimsy je sepsána pečlivě a hezkým stylem, i po formální stránce je na výborné úrovni. Z úvodní teoretické části v kapitole 2 je zřejmé, že si pan Šimsa osvojil základy MRCC metod na úrovni odpovídající bakalářskému studiu. Kapitola 3 je věnována oxyallylovému diradikálu včetně diskuse výsledků dostupných v literatuře a jsou v ní uvedeny technické detaily prováděných výpočtů. Vlastní výsledky pana Šimsy jsou pak podány ve čtvrté kapitole; v době psaní tohoto posudku byl již odeslán článek do Chem. Phys., který je na těchto výsledcích (a několika dalších, které se do uzávěrky této práce nestihly) založen a jehož prvním autorem je pan Šimsa.

Z výše zmíněných důvodů vřele doporučuji udělení bakalářského titulu.

Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat.
školitel