

**Oponentský posudek bakalářské práce Daniela Šimsy  
„Výpočet energetického rozštěpení mezi singletovým a triplexovým stavem oxyallylového  
diradikálu pomocí multireferenčních metod spřažených klastrů“**

Předložená bakalářská práce se zabývá studiem elektronové struktury jmenovaného biradikálu pomocí multireferenčních (MR) metod spřažených klastrů (CC). Nedávno byla změřena fotoelektronová spektra tohoto biradikálu a jsou k dispozici i kvantověchemické výpočty jiných autorů získané metodami DFT, CASSCF, CASPT2, MRCI a EOM-SF-CCSD(dT). Proto tento systém představuje vhodný test pro pokročilé MR metody.

Po kratším úvodu autor stručně avšak vcelku výstižně shrnuje některé důležitější základní kvantověchemické pojmy. To, že ve vlastní práci používaným MR metodám (MR-BWCC a MR-MkCC) věnuje jen půl stránky, je na úrovni bakalářské práce přijatelné, protože příslušná teorie je velmi náročná a obsáhlá. Vytýkám však autorovi, že nezařadil ani jedinou citaci, jež by se ke zmíněným metodám vztahovala. Třetí kapitola se zabývá oxyallylovým biradikálem a výpočty jeho vlastností. Seznamuje čtenáře s publikovanými důležitějšími experimentálními a teoretickými výsledky a zahrnuje nezbytné výpočetní detaily v práci použité. Na str. 19 je, myslím, překlep ve specifikaci aktivního prostoru orbitalů ( $1b_1$  místo  $1b_2$ ). Diskuse výsledků (kap. 4) je sepsána stručně, srozumitelně a přehledně. Práce je doplněna dvěma dodatky. Jedním z nejvýznamnějších přínosů práce je závěr, že pro soulad s experimentem (u biradikálů) je nezbytné zahrnutí triexcitací v metodě MkCC. Bylo by však účelné se zmínit i o výsledcích výzkumu dříve studovaného biradikálu methylenu a oba systémy diskutovat a porovnat.

Z drobných nedopatření (kromě překlepů) upozorňuji na chybějící závorku v rovn. (2.5), nejednotnost v psaní citací, chyby v adjektivech (např. ve slovech coulombický, fockovský). Slovo viz se píše bez tečky a pojí se s akusativem, slova (zkratky) obr., tab. či příloha se v češtině píší ve větě s malými počátečními písmeny. Místo full CI by mělo být úplná CI. Myslím, že místo size-extenzivní by stačilo jen extenzivní (poté, co by byl tento pojem vysvětlen). V češtině nevypadá hezky ani pojem Hilbert space multireferenční metody.

Souhrnem konstatuji, že bakalářská práce Daniela Šimsy přinesla řadu velmi zajímavých poznatků, má (i přes drobné výhrady) velmi dobrou úroveň, a proto ji doporučuji k obhajobě. Navrhuji klasifikaci známkou výborně.

Doc. RNDr. Jiří Fišer  
KFMCh PŘF UK

Praha, 9.6. 2011