

**Oponentský posudek bakalářské práce**  
*Multireferenční CC výpočty s použitím optimalizovaných virtuálních orbitalů*  
Jakuba Langa

Předložená práce nespĺňuje Článek 5 odstavec 4 a Článek 15 odstavec 1 opatření děkana č. 16/2010. Dle sdělení studijní proděkanky existuje nadřazený dokument, který to je, mi však nesdělila, a tak jsem toto tvrzení nemohl ověřit. Práce obsahuje víc než 100 drobných formálních nedostatků, jako (spell-checkerem) odhalitelné překlepy, chybějící obvyčejné i Diracovy závorky, desetinné tečky a jindy čárky, záměny lomítka a obráceného lomítka, zkratky *et al.* v referencích, obrázky bez čísla, matematické symboly v textu nejsou kurzivou, symboly prvků jsou místy malým písmem, prázdný list uprostřed textu a další. To je způsobeno patrně zejména tím, že předkladatel nedal před odevzdáním práci školiteli k posouzení.

Podobné výhrady mám i k teoretickému úvodu, který tvoří asi 3/4 práce. Metodologie použitá v práci je značně pokročilá a i jen stručně ji v práci popsat je obtížný úkol. Zde však lze text sledovat jen se značnými obtížemi, neboť symboly v rovnicích často nejsou vysvětleny, chybí definice, mění se zápis integrálů, v poznámce po čarou se zmiňuje, že John C. Slater byl Američan i definici-nedefinici kreačních a anihilačních operátorů, nebo fakt, že grupa všech permutací je symetrickou grupou, který pro text nemá žádný význam. Luštění, co přesně ta která rovnice znamená, či opravy chyb v nich čtenáře po několika stranách unaví. Pro většinu předkladatelů je bakalářská práce první delší souvislý text v životě, v tomto případě navíc i značně obtížný, ale musí z něj být patrné, že rozumí tomu, co píše.

Vlastní výsledky popsané asi na 5 stranách představují výpočty pro 2,3-diyldimethyl-1,3-butadien (v práci nazývaný tu tetrametylenmetán jinde pak tetrametylenetán) a methylenu pro 2 elektronové stavy, jednu bázi, pevnou geometrii, několik CC metod a různý stupeň redukce prostoru virtuálních orbitalů. V prvním případě se nepodařilo všechny plánované výpočty uskutečnit, ve druhém ano a je ukázáno, že vhodnou redukcí lze dosáhnout zajímavého zrychlení při dostatečném zachování přesnosti. Některé z vypočtených energií jsou prezentovány až třikrát. Sloučení některých obrázků a tabulek (a posun energií o vhodnou konstantu) by značně přispělo k čitelnosti práce.

Protiv motivaci a metodologii práce a jejím výsledkům není co namítat, snad jen malý objem výpočtů pro silnější potvrzení užitečnosti této metody (výpočty ještě netrvají nijak extrémně dlouho). Text a úprava práce mi ale přijdou natolik odbyté, že si zaslouží potrestat přepsáním.

F. Uhlík  
15/6/2011