

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Jan Hermann
Název práce: Assessment of Dispersion Corrected Density Functional Methods
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika
Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Ota Bludský, CSc.
Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie, AV ČR,
v.v.i.
Kontaktní e-mail: ota.bludsky@uochb.cas.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/oponenta:

Bakalářská práce Jana Hermanna „Assessment of Dispersion Corrected Density Functional Methods“ se zabývá aplikací metod založených na teorii funkcionálu hustoty (DFT) pro popis disperzně vázaných systémů. Z široké škály teoretických přístupů popsaných v literatuře se tato práce zaměřuje na metody zahrnující disperzní interakce pomocí atomových potenciálů. Úroveň práce je podle mého soudu velmi vysoká, a to jak po odborné, tak i po jazykové stránce. Musím ocenit zejména kvalitu textu, který se svojí přehledností a srozumitelností zcela vymyká běžnému „standardu“ bakalářských prací. Hlavním problémem metody lokálních atomových potenciálů (LAP) je otázka přenositelnosti, tj. nakolik jsou LAP parametrizované na jednoduchých modelech použitelné i pro komplexní systémy, jako jsou např. biomolekuly. Touto otázkou se zabývá aplikační část práce, která na příkladu interakce vzácných plynů s molekulou benzenu názorně ukazuje problematičnost základních východisek metody LAP. Nutno zdůraznit, že tento výsledek je v rozporu se závěry publikovanými v odborné literatuře (např. J. Chem. Phys. 2008, 129, 154102).

Závěrem konstatuji, že Jan Hermann prokázal při vypracování své bakalářské práce nejen vynikající technické předpoklady, ale i kritické myšlení, které je nezbytnou součástí každé vědecké práce. Proto doporučuji tuto práci k obhajobě s hodnocením **výborně**.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 26. 8. 2011