

Školitelský posudek diplomové práce

pana Bc. Mateje Švani

na téma

*Study of Diradicals by Explicitly Correlated Multireference Coupled
Cluster Methods*

Cílem diplomové práce pana Mateje Švani bylo aplikovat nově vyvinuté multireferenční metody spřažených klastrů s explicitní korelací (F12) na studii izomerizace cyklopropanu na propen, která probíhá přes diradikálové intermediáty. Výpočty korelační energie molekul, prováděné pomocí CI nebo CC metod, narážejí na problém pomalé konvergence s velikostí báze, neboť rozvoj do jednoelektronových orbitalů nedokáže dobře vystihnout tvar mnohoelektronové vlnové funkce pro dva k sobě se blížící elektrony. Proto byly zavedeny tzv. explicitně korelované metody, které do vlnové funkce přidávají členy závislé na mezielektronových vzdálenostech. Tuto explicitní korelaci jsme nedávno implementovali ve spojení s multireferenčními CC metodami na úrovni mono-, bi- a poruchových triexcitací. Výsledky výpočtů provedených panem Švaňou ukazují, že technika F12 funguje velmi dobře i pro uvedené MRCC výpočty a lze dosáhnout dobré shody vypočtených hodnot s experimentem, při snížení výpočetní náročnosti v porovnání s konvenčními metodami s CBS extrapolací.

Diplomová práce pana Švani je sepsána v angličtině, přičemž po jazykové i formální stránce je na výborné úrovni. Z kapitoly věnované teorii je zřejmé, že si pan Švaňa osvojil základy MRCC metod a techniky R12/F12 na úrovni odpovídající magisterskému studiu. Vlastní výsledky pana Švani jsou pak podány ve třetí kapitole, kde se postupně věnuje výpočtům trimethylenu, propylidenu a cyklopropanu. Pan Švaňa svými výsledky ukázal, že pro dosažení stejné celkové energie explicitně korelovaným MR výpočtem oproti klasickému MR výpočtu stačí použít bázi s kardinálním číslem o stupeň menším, což vede na úspory výpočetního času. Výsledná aktivační energie izomerizace cyklopropanu na propen přes trimetylen je v dobré shodě s experimentální hodnotou z literatury.

Předloženou práci doporučuji hodnotit stupněm výborně a po její obhajobě a složení státní zkoušky doporučuji udělení magisterského titulu panu Švaňovi.

Praha, 29.8.2013

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

