

Posudek oponenta na diplomovou práci „Fotogenerace nosičů náboje v substituovaných polyacetylenech“ vypracované Bc. Michalem Jexem

Cílem předložené práce je získání některých parametrů zobecněného Archipova modelu fotogenerace nosičů náboje v polymerních materiálech přímo z kvantově chemickým modelů interagujících oligomerů. Práce představuje interdisciplinární studium na pomezí fyziky pevné fáze, kvantové chemie a polymerní chemie. Jedná se o relativně obtížnou tematiku diplomové práce, kterou však diplomant dobře zvládl. Je třeba říct, že ne každý magisterský student fyzikální chemie by tuto problematiku zvládl a že diplomant zde využil svých velice nadstandardních znalostí fyziky. Výsledky jasně ukazují, že zvolená strategie vede k podstatnému vylepšení schody s experimentálními daty a že tato mohou být vysvětlena (na rozdíl od původního modelu) s jednou sadou parametrů.

Za nejpřínosnější vylepšení Archipova modelu lze považovat nahrazení Coulombického potenciálu lokalizovaného elektronu potenciálem parciálních nábojů distribuovaných podél polymerního řetězce získaného na základě kvantově chemických výpočtů.

Celkově hodnotím předloženou práci jako velice zdařilou, a to jak z hlediska vybraného tématu, tak i vzhledem k jejímu zpracování. Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji známku výbornou. Několik kritických připomínek uvádím níže. Je ovšem třeba podotknout, že tyto připomínky nejsou nijak zásadní a jsou myšlené jako konstruktivní kritika, která se snad bude diplomantovi hodit v jeho další vědecké kariéře.

Úsilí spojené s vypracováním práce v anglické jazyce rozhodně zaslouží ocenění. Dá se konstatovat, že práce je napsána slušnou angličtinou, přesto se nelze vyhnout alespoň několika jazykovým připomínkám:

- Jazyková úroveň výsledkové části (počínaje kapitolou 3.1) je o něco slabší než úvodní kapitoly. Tato část je z velké části sepsána chronologicky, tak jak byla studie prováděna. Ve většině případů (včetně této práce) je ale vhodnější logiku práce nezakládat na historii studie a na místo toho najít optimální koncepci z hlediska snadného pochopení čtenářem. Tato část je zbytečně dlouhá a obsahuje výsledky, které nemají k závěrům práce jiný vztah, než že byly v průběhu práce získány.
- V odborném jazyce je vhodné se vyhnout psaní v první osobě a místo toho je lepší používat trpný rod (příklad, strana 29 - "The first thing we had to know about the polymer ...", strana 27 - "Another approach we employed later ...").
- Přísllovečná určení se v angličtině dávají na konec věty a nikoliv na začátek (příklad, strana 29 - "In Figure 3 these configurations are denoted ...").
- Některé věty nedávají úplně smysl (příklad, strana 25 - "A straightforward results in ...").

Mezi připomínky (méně závažné) k předložené práci patří:

- Je obvyklé (a pro čtenáře vhodnější) uvádět relativní energie jednotlivých struktur vzhledem k energii nejstabilnější struktury namísto celkových energií, jak je uvedeno v tabulkách 3.1 a 3.2.
- Výsledková část 3 obsahuje velké množství obrázků. Část z nich se zdá být nedůležitá. Bylo by užitečnější uvádět v této části menší počet obrázků.

Otázky, které by měl diplomant zodpovědět v rámci obhajoby:

1. Optimalizované struktury dekamerů mohou být pouze lokální minima na hyperploše potenciální energie a nemusí nezbytně odpovídat globálním minimům. Je jasné, že výsledky práce tímto nejsou nijak zásadně ovlivněny, ale pro úplnost by toto mělo v textu být zmíněno. Jakým způsobem by se muselo postupovat, aby se dalo vyhnout problému optimalizace do lokálních minim?
2. Interakce dvou dekamerů je popsána v části 3.2. Jedná se o poměrně nestandardní a komplikovaný přístup založený pouze na hledání optimálního vdW kontaktu. Pokud jsem tuto část dobře pochopil, zvolený přístup nebere do úvahy interakční energie (tedy ani elektrostatickou interakci). V čem je výhoda zvoleného přístupu vzhledem k obecně používané optimalizaci geometrie pomocí molekulové mechaniky se zafixovanými intramolekulárními stupni volnosti?
3. Bylo by možné využít experimentální strukturní data, například párové distribuční funkce z rentgenostukturní analýzy?

V Praze 21. 5. 2013

Doc. Petr Nachtigall