

Posudek školitele na diplomovou práci Bc. Michala Jexe

„Fotogenerace nosičů náboje v substituovaných polyacetylenech“

Pan Michal Jex vypracoval svoji diplomovou práci na Ústavu makromolekulární chemie AV ČR, v.v.i. na oddělení optoelektronických jevů a materiálů za aktivního působení dvou konzultantů – specialistů: Dr. P. Tomana a Dr. M. Menšíka. Práce je výlučně teoretická a řeší velmi komplexní problém procesu fotogenerace volných nosičů náboje v polymerních polovodičích. Porozumění mechanismu vzniku volných nosičů náboje má zásadní význam pro vývoj nových materiálů pro organické solární články.

V úvodu práce student shrnuje různé teoretické modely popisující fotogeneraci volných nosičů náboje v organických látkách. Teoretické základy zvládl velmi dobře. Prokázal schopnost samostatného uvažování a velmi dobré obecné teoretické a matematické základy. Diplomová práce vychází z Archipovova modelu a rozvíjí dřívější práci diplomanta, ve které použil tento model pro vysvětlení experimentální závislosti výtěžku fotogenerace volných nosičů náboje v poly[1-trimethylsilylfenyl-2-fenyl]acetyleny na elektrickém poli. Cílem této diplomové práce bylo zahrnout do výpočtu kvantové efekty působící při vytváření stavů s přenosem náboje, a průběh potenciálu páru elektron-díra a hodnoty přenosových integrálů stanovit na základě kvantově-chemických výpočtů.

Diplomat projevil při řešení problému velkou dávku samostatnosti a fyzikální invence. I když provedené výpočty představují určité kompromisní řešení, dané rozsahem studovaného systému a možností výpočetní techniky, zejména pak dostupnou výpočetní kapacitou, dosahují vypočtené modelové závislosti v porovnání s předchozím klasickým přístupem podstatně lepší shodu s experimentálními daty. Experimentální závislosti účinnosti fotogenerace nosičů náboje na elektrickém poli bylo možno na rozdíl od předchozího přístupu modelovat v celém rozsahu intenzit elektrického pole pomocí jedné sady parametrů, přičemž nový model používá pouze tři parametry, které mají přímý vztah k fyzikálním procesům probíhajícím v polymeru při generaci volných nábojů po absorpci fotonu.

Předložená práce diplomanta splňuje kvalitativní podmínky k tomu, aby mohla být uznána jako práce diplomová. Po odborné stránce lze dosažené výsledky i celkový přístup studenta k dané problematice hodnotit klasifikačním stupněm výborně. Úroveň presentace výsledků sice již takové vysoké úrovně nedosahuje, stále bych se však přikláněl k celkovému hodnocení práce stupněm výborně.

V Praze, 23. května 2013

RNDr. Jiří Pfleger, CSc.
ÚMCH AV ČR, v.v.i.
školitel