

POSUDEK BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Michal Maixner vypracoval v roce 2013 svou bakalářskou práci na téma

Studium interakčních a adhezních energií polyanilinových modelů s povrchy vybraných materiálů metodami kvantové chemie.

Předkládaná bakalářská práce se věnuje aktuálnímu tématu vodivých polymerů, konkrétně problematice tenkých polyanilinových vrstev deponovaných na silikátovém substrátu. Vzhledem ke skutečnosti, že drtivá většina vědeckých prací v této oblasti je experimentálního charakteru, představuje počítačové modelování významné doplnění a přínos práce je o to vyšší. Fakt, že struktura tenké vrstvy na skle byla vzhledem k výpočetním možnostem redukována na systém „1 polymerní řetězec/substrát“, není na škodu, neboť ve výsledku představuje první krok snahy o vytvoření metody charakterizace těchto systémů metodami kvantové chemie, kterážto by měla být dále rozvíjena např. v práci diplomové.

Kladně lze hodnotit srovnání výsledků výpočtů s dostupnými experimentálními daty.

Teoretická část práce dokazuje, že se bakalář s tématem seznámil a porozuměl mu. Praktická část je sepsána srozumitelně, výsledky na sebe logicky navazují a v závěru je shrnuto vše podstatné.

Největším nedostatkem předkládané práce je paradoxně její samotné zpracování, kterému měla být (a do budoucna musí být) věnována větší pozornost a péče.

Menší připomínky k textu:

- 1) překlapy
"...sperácie vlnovej funkcie..." (str.10)
"...možno hamiltonián seprovať podľa..." (str.10)
"...Amsterdam-Oxfrod-New York..." (str.33)
- 2) velká/malá písmena
"...zaviesť fockov operátor..." (str. 4)
"...kde fockov operátor..." (str. 4)
"...pripravil v moldene odhadom..." (str.15)
- 3) nejednotnost
popisek obrázku "Obr.1:" se neshoduje s popisky ostatních "obr.2 -", "obr.3 -", atd. (str. 12)

mezery mezi hodnotou a její jednotkou jednou jsou, jindy nikoliv (např. str. 23, ale i jinde)
- 4) nejasný pojem
"...Najskôr som štruktúru optimalizoval pre zmrznuté horné ramená Si..." (str. 15)
"...som najskôr nechal zamrznúť na..." (str. 15)

"fixace prostorových souřadnic" by v tomto případě bylo vhodnější, než termín "zmrznutí"
- 5) malé obrázky
popisy v obrázku 4 (tzn. písmena A, B, C) jsou

velmi malé, obrázky spekter (Graf 2 a další) by měly být pro přehlednost větší

Významnější připomínky k textu:

- 1) Nesprávné pořadí citací a chybějící citace. Odkaz [6] je uveden dříve, než odkazy [2], [4] a [5], přičemž odkaz [3] v textu chybí (str. 12 a 13)! Rovněž odkazy [11], [12] a [13] v textu chybí!
- 2) V kapitole 2.2 se hovoří o modelu skla („*Model skla som si opäť pripravil...*“) a dále se píše "*Toto usporiadanie je nevhodné pre výpočet adhéznej energie, keďže v praxi je podložka nie lineárna ako mnou počítané systémy ale plošná (obr. 6,7), takže na nej nie sú „výčnelky“, ktoré by mohli ovplyvňovať uloženie polyanilínu.*" (str. 15 a 16). Argumentace je správná a v tomto duchu snaha o úpravu malých fragmentů pochopitelná, avšak s tou výhradou, že struktura na obr. 6 a 7 není sklo, nýbrž jílový minerál montmorillonit.
- 4) Nejednotná forma citací literatury. Celá křestní jména vs. iniciály, pouze první strana vs. rozsah stran od-do, zcela náhodné používání kurzívy pro název článku či časopisu, atd.

Prosím o zodpovězení následující otázky:

- 1) Na str. 15 se hovoří o natočení atomů vodíku vzhůru v průběhu optimalizace a o dodatečné „ruční korekci“ této jejich orientace po skončení optimalizace z důvodu obdržení hladké plochy. Dále je napsáno: "*Chyba takéhoto zásahu do štruktúry podložky by však mala byť rovnakého rádu ako zanedbanie „rovinného“ usporiadanie podložky a nahradenie „lineárnym“ usporiadaním.*"

Na základě čeho se tak autor domnívá?

Lze konstatovat, že cíle bakalářské práce byly naplněny. Naneštěstí je vlastní text sepsán poněkud nedbale, možná ve spěchu. Bakalářská práce nicméně splňuje požadavky MFF UK Praha a doporučuji ji klasifikovat stupněm

===velmi dobře===

Ostrava, 8. 8. 2013

Ing. Jonáš Tokarský, Ph.D.