

Posudek na bakalářskou práci pana **Michala Maixnera**: "Studium interakčních a adhezních energií polyanilínových modelů s povrchy vybraných materiálů metodami kvantové chemie."

Pan Michal Maixner začal velmi pilně a svědomitě pracovat na své bakalářské práci hned po jejím zadání. Díky svému značnému pracovnímu nasazení rychle zvládl práci s operačním systémem Linux i kvantově-chemický program Gaussian 09,, který používal k výpočtům studovaného reakčního mechanismu. Rovněž se naučil provádět analýzy vlnové funkce a určovat termodynamické parametry chemických reakcí. Tím se také zapojil do řešení grantového projektu GA ČR GACR P108/11/1057 "Příprava, struktura a vlastnosti nanokompozitů vodivý polymer/fylosilikát".

Bakalářská práce je po grafické stránce na výborné úrovni, je napsána přehledně, všechny vypočtené výsledky jsou diskutovány v přiměřeném rozsahu a pro snadnou orientaci v textu doplněny názornými schematickými vzorci.

Po odborné stránce bych rád zdůraznil značný objem výsledků, kterého díky svému pracovnímu nasazení dosáhl. Studované systémy byly popsány pomocí několika různých modelů: v plynné fázi metodami Hartreeho-Focka a DFT.

Pan Michal Maixner je student s vynikajícím prospěchem, který po celou dobu pracoval samostatně a velmi spolehlivě.

Bakalářskou práci plně doporučuji k obhajobě navrhuji klasifikovat ji jako výbornou.

V Praze 4.9. 20113

Prof. Jaroslav Burda, DrSc.