

Vyjádření školitele k diplomové práci pana

Graciána Tejrala

na téma

Ab initio molekulová dynamika a simulace femtosekundového spektra klastru Na_3F

Pan Gracián Tejral se ve své diplomové práci zabýval výpočty molekulové dynamiky (MD) klastru Na_3F v rámci projektu, na němž jsem spolupracoval se skupinou prof. Bonačič-Koutecké v Berlíně. Během svého působení v mé skupině a při návštěvě v Berlíně provedl výpočty řady MD trajektorií tohoto klastru pomocí námi vyvinutého programu. Během této práce se pan Tejral seznámil se základy molekulové dynamiky a zvládnul potřebné techniky k provádění MD výpočtů, přitom se uplatnily i jeho velmi dobré znalosti Linuxu. Nicméně problémem byla jistá nespolehlivost a problémy v komunikaci, které vyvrcholily tím, že pan Tejral poté, co nestihl odevzdat diplomovou práci v řádném termínu, se mnou úplně přestal komunikovat a vůbec se nezúčastnil ani přípravy publikace, jejíž součástí byly i jeho výpočty [J. Chem. Phys. 125, 024303, 2006]. Předloženou diplomovou práci jsem tak měl možnost vidět teprve několik dnů před obhajobou (kromě teoretické části, jejíž předběžné verze pan Tejral se mnou již dříve diskutoval).

Z úvodní teoretické části je zřejmé, že si pan Tejral osvojil teoretické základy, na nichž je ab-initio molekulová dynamika založena, na úrovni odpovídající magisterskému studiu. Následující část práce, věnovaná popisu a rozboru vlastních výsledků, je ovšem neúnosně stručná. Např. v části 4.3 jsou pouze zopakovány nadpisy obrázků bez jakéhokoli dalšího vysvětlení. Bylo by lepší části 4.3 a 4.4 spojit a každý obrázek hned (podrobněji) diskutovat. Obr. 8 je redundantní, neboť simulované spektrum je uvedeno také v obr. 9 v porovnání s experimentem. Práce by si též zasloužila větší pečlivost při sepisování, bylo by dobré odstranit gramaticky nekonzistentní formulace a chyby, např. na str. 5 "...reprezentované operátorem Ω vyjádřený rovnicí", na str. 6 "...definice vyjádřené pomocí rovnicí ...", "do Schroedingerovy časové závislé rovnice", nebo na str. 36 "Po 700fs je soubor trajektorií expandován do celého prostoru byly pozorovány první trajektorie ukončené...".

Práci v současné podobě nemohu doporučit, nicméně domnívám se, že po úpravách a rozšíření diskuse výsledků ji bude možné úspěšně obhájit.

Mgr. Jiří Pittner, Dr. rer. nat.

20. září 2007

školitel