



Oponentský posudek na bakalářskou práci

Lukáš Grajciar: „Reliability of DFT methods for the description of electronically excited states of copper ions“.

Bakalářská práce Lukáše Grajciara se zabývá kvantově-chemickými výpočty excitačních energií komplexů jednomocného kationtu mědi. V úvodu práce jsou stručně nastíněny použité metody a modelové systémy, výsledková část práce obsahuje orbitální diagramy a přehledně uspořádané excitační energie získané CC (coupled clusters) a DFT metodami. Práce přes svůj nevelký rozsah (34 stran textu včetně seznamu literatury) obsahuje značné množství informací, které jsou velmi pečlivě zpracovány a utříděny, takže práce jako celek působí kompaktně a přehledně. Jediné, co bych mohl v tomto ohledu vytknout, je snad až příliš stručné zpracování výsledků pro ZSM-5 zeolit, kde jediným vodítkem pro čtenáře je obrázek klastrových modelů I2, M6 a Z8 aktivních center (obr. 7 na straně 23). Práce má velmi široký záběr, obsahuje zajímavé srovnání metod pro výpočet excitačních energií a dále závislost excitačních energií na velikosti systému. Výsledky pro klastrové modely jsou následně aplikovány na reálný systém Cu^+ iontu v komplexním molekulovém prostředí. Diskuze obsažená v závěru práce je vedena na vysoké odborné úrovni.

Po formální stránce je práce vypracována velmi pečlivě a s výjimkou několika málo případů (např. chybné vzorce komplexů mědi v tabulkách 2 a 3) je bez závažnějších formálních chyb. Bakalářská práce je napsána v anglickém jazyce a i zde je třeba ocenit její velmi vysokou úroveň.

Závěrem mohu konstatovat, že bakalářská práce pana Lukáše Grajciara bezpochyby splňuje veškeré nároky a mohu ji tak bez výhrad doporučit k obhajobě.

V Praze dne 19. června 2007

RNDr. Ota Bludský, CSc.

