



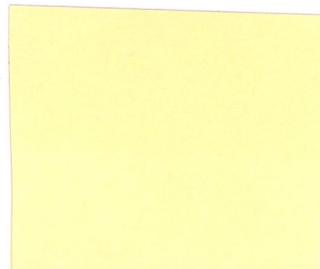
Posudek školitele

na bakalářskou práci „Reliability of DFT methods for the description of electronically excited states of copper ions“

Pan Lukáš Grajciar pracoval na své bakalářské práci v mé skupině v době od října 2006 do května 2007. Během této doby se zabýval výpočty interakčních energií a zejména výpočty excitačních energií relativně malých komplexů jednomocných iontů mědi. Témata vyžadovala zvládnutí práce s několika kvantově chemickými programy (Gaussian a hlavně Molpro), praktickou znalost elementární teorie grup, práci v operačním prostředí Unix a dobré porozumění základů kvantové chemie. Pan Grajciar si snadno osvojil potřebné techniky a prokázal dobré znalosti jak v kvantové chemii, tak v elementární teorii grup.

Pan Grajciar prokázal velikou samostatnost při práci na tématu a také při vlastním psaní bakalářské práce. Vzhledem k tomu, že se jedná o studenta 3. ročníku, je třeba jeho samostatnost o to více ocenit. Vlastní bakalářskou práci hodnotím velice kladně; student jednoznačně prokázal schopnost přehledně uspořádat dosažené výsledky a velice stručně a jasně (v anglickém jazyce) popsat vlastní výsledky a diskutovat je. Znovu musím vyzvednout samostatnost pana Grajciara při psaní bakalářské práce. Podle mého názoru bakalářská práce jednoznačně ukazuje, že pan Grajciar je schopen samostatné vědecké práce. Proto doporučuji práci k obhajobě.

V Praze, dne 20. června 2007



Doc. RNDr. Petr Nachtigall, PhD.
(školitel)