ÚOCHB AV ČR

ÚSTAV ORGANICKÉ CHEMIE A BIOCHEMIE
AKADEMIE VĚD ČESKÉ REPUBLIKY
INSTITUTE OF ORGANIC CHEMISTRY AND BIOCHEMISTRY
ACADEMY OF SCIENCES OF THE CZECH REPUBLIC

ODDĚLENÍ MOLEKULOVÉHO MODELOVÁNÍ
DEPARTMENT OF MOLECULAR MODELING

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. Tématika 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 smostatnost 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)