

Posudek na bakalářskou práci slečny Kateřiny Smítalové: " Kvantově-mechanické výpočty hydridů přechodných kovů; porovnání vibrační analýzy s experimentálními daty " .

Slečna Kateřina začala velmi pilně a svědomitě pracovat na své bakalářské práci hned po jejím zadání. Díky svému pracovnímu nasazení rychle zvládla práci s operačním systémem Linux i kvantově-chemickým programem Gaussian 09, který používala k výpočtům reakčního mechanismu. Rovněž se naučila provádět analýzy vlnové funkce, které tvořily nedílnou součást kontroly správnosti disociačních povrchů diatomik. Tím se také zapojila do řešení grantového projektu "Studium interakcí transitních kovů s modely biomolekul" neboť z její práce jasně vyplynula výhodnost námi navržené báze k výpočtům rozsáhlejších systémů (při srovnání náročnosti a přesnosti výpočtů).

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 tabulkami a názornými obrázky.

Slečna Kateřina Smítalová je bystrá studentka s velkým kreativním potenciálem, po celou dobu pracovala samostatně a rovněž velmi spolehlivě.

Bakalářskou práci doporučuji k obhajobě navrhuji klasifikovat ji jako výbornou.

V Praze 29.8. 2018

prof. Jaroslav Burda