

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Mikuláš Matoušek

Název práce: Electronic structure calculations of biologically relevant transition metal complexes

Studijní program a obor: Fyzika, Biofyzik a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2020

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Doc. Mgr. Tomáš Mančal, PhD.

Pracoviště: Fyzikální ústav UK, MFF UK

Kontaktní e-mail: mancal@karlov.mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:

Předložená práce se zabývá kvantově chemickými výpočty nejnižších kvintetních a tripletních stavů modelového porfyriu. Modelový systém je vybrán s ohledem na značnou aplikační důležitost profyriu a také na jistou kontroverzi v určení vlastností základního stavu metaloporfyriu se skupinou Fe(II), který se za jistých okolností vyskytuje jako triplet, jindy jako kvintet, v závislosti na změnách geometrie molekuly v důsledku interakcí s molekulárním okolím. Autor demonstruje výsledky ve shodě s experimentálními poznatky, včetně předpovědi kvintetního základního stavu pro izolovanou molekulu.

Jak je zvykem v oboru kvantové chemie, vědecká práce je často kolektivní, nicméně zdá se, že autor se orientuje v kvantově chemických problémech a výpočtech značně samostatně. Výsledky práce jsou částečně zpracovány ve formě publikace zaslané do recenzovaného časopisu a autor práce poskytuje také výhled, kam se bude práce dále ubírat. Práce obsahuje pěkný teoretický úvod do problematiky a do použitých kvantově chemických metod, stejně tak jako kapitolu uvádějící čtenáře do studovaných modelových systémů. Je sepsána velmi pěknou angličtinou s naprostým minimem tiskových a gramatických chyb (zde hovořím z perspektivy českého čtenáře, neboť svoji občasnou nespokojenost nad autorovým použitím členů nemohu dost dobře prohlásit za problém autorův). Práce je opatřena dodatky a je rozsáhle citováno z relevantní literatury.

Vzhledem ke kvalitnímu zpracování práce a jejím zřejmým výsledkům doporučuji uznat práci za diplomovou a s hodnocením výborně.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci doporučuji nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm: výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta:

V Praze, 22. 6. 2020