

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího  posudek oponenta  
 bakalářské práce  diplomové práce

Autor/ka: Mikuláš Matoušek

Název práce: Výpočty elektronové struktury biologicky relevantních komplexů přechodných kovů

Studijní program a obor: BCHF

Rok odevzdání: 2020

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Libor Veis, Ph.D.

Pracoviště: Ústav fyzikální chemie, AV ČR

Kontaktní e-mail: libor.veis@jh-inst.cas.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/opponenta:

Pan Matoušek se ve své práci věnuje kvantově chemickým výpočtům dvou molekulárních systémů na bázi porfyrinu s navázaným atomem železa. V prvním případě se jedná o zjednodušený model samotného Fe-porfyrinu, na kterém byl ukázán důležitý vliv geometrie, konkrétně vzdálenosti mezi atomy železa a dusíků, na pořadí nejnižší ležících spinových stavů.

V druhém případě se jedná o komplex Fe-porfyrinu s karbenem, jenž je důležitý meziprodukt v bio-inspirovaných moderních syntézách.

Při výpočtech elektronové struktury zmíněných molekul pan Matoušek využil celou škálu kvantově chemických metod včetně těch založených na metodě renormalizační grupy matice hustoty (density matrix renormalization group, DMRG), jejichž vývojem se v naší skupině zabýváme. Pan Matoušek získal velmi cenné výsledky, které vysvětlují nedávné experimenty a jsou součástí publikace zaslané do tisku. V neposlední řadě také ověřil použitelnost nově vyvinutých výpočetních metod.

Jako školitel mohu říci, že pan Matoušek pracoval se zájmem, samostatně a iniciativně. Jeho práce je psaná dobrou angličtinou, což není samozřejmostí. Také bych rád zdůraznil, že pan Matoušek provedl velké množství výpočtů s pomocí kvantově-chemických metod, jejichž použití není zcela triviální a vyžaduje patřičné znalosti a zkušenosti, které si musel osvojit. Závěrem bych rád řekl, že pan Matoušek se jako diplomant velmi osvědčil a vřele doporučuji jeho diplomovou práci k obhajobě.

### **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/oponenta:

Praha, 24.6. 2020

