

Posudek na diplomovou práci pana Tomáše Kovalča:

„Teoretické studium interakčních modelů dirhodiových komplexů“

Ve své diplomové práci studoval pan Tomáš Kovalč interakce dirhodiového komplexu $[(\text{CH}_3\text{COO})_4(\text{H}_2\text{O})_2\text{Rh}_2]$ v různých oxidačních stavech s amoniakem a guaninem.

Pro studium reakcí relativně velkého komplexu těžkého kovu s výše uvedenými molekulami se mi jeví zvolený přístup – metoda DFT, s relativně spolehlivým hybridním funkcionálem Becke3-LYP spolu s quazirelativistickými pseudopotenciály pro Rh a s 6-31g* bazí či rozšířenou Duningovou bází (aug-cc-pvdz) pro ostatní atomy, adekvátní pro řešení daného problému. Diplomant použil výpočetně náročný přístup modelování superkomplexu.

Diplomantovi se v jeho práci podařilo nalézt všechny základní informace o produktech a tranzitních stavech studovaných procesů. Zoptimalizoval geometrie jednotlivých superkomplexů a získal potřebná data k určení termodynamických parametrů studovaných reakcí. Zjistil vliv změny báze na hodnoty reakčního tepla, změny entalpie a Gibbsovy volné energie. Oceňuje, že se neomezil pouze na popis energetiky daných reakcí, ale získal i kinetické parametry. Tento úkol je vysoko náročný jak z hlediska přesnosti určení energetických povrchů, tak i na následného statisticko-fyzikálního zpracování. Vzhledem k tomu, že v práci je modelována biologická aktivita dirhodiového komplexu, bude v budoucnu třeba do modelu dodat vliv prostředí. Z práce je však zřejmé, že diplomant si je tohoto faktu je vědom.

Diplomová práce je napsána přehledně, výsledky jsou vhodně graficky ilustrovány. Množství provedených výpočtů a rozsah práce svědčí o mimořádné píli a pracovitosti diplomanta.

Všechny důležité výsledky jsou diskutovány v dostatečném rozsahu a svědčí mimo jiné i o skutečnosti, že diplomant velmi dobře porozuměl studované problematice. Práce má výbornou grafickou úpravu, je psána slovensky, takže nejsem schopen posoudit eventuelní gramatické chyby.

Diplomovou práci doporučuji k obhajobě navrhoji klasifikovat ji jako výbornou.



V Praze dne 6.9.2007

Ing. Stanislav Záliš, CSc.