

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- | | |
|--|--|
| <input type="checkbox"/> posudek vedoucího | <input checked="" type="checkbox"/> posudek oponenta |
| <input type="checkbox"/> bakalářské práce | <input checked="" type="checkbox"/> diplomové práce |

Autor: Bc. Ivan Ivani

Název práce: Modern computational techniques for simulations of molecular spectra

Studijní program a obor: Fyzika, biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2010

Jméno a tituly oponenta: RNDr. Josef Kapitán, Ph. D.

Pracoviště: Katedra optiky, Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého, 17. listopadu 12,
77146 Olomouc

Kontaktní e-mail: kapitana@optics.upol.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 oponenta:

Práce Bc. Ivana Ivaniho je převážně teoretickou studií zabývající se využitím metody Fourierovy transformace k simulaci vibračních spekter. Jde o poměrně novou metodu, která najde uplatnění při simulaci anharmonických efektů, případně výpočtu spekter velkých molekul, pro něž je přímá diagonalizace Hamiltoniánu těžko proveditelná. Velkou část práce (cca dvě třetiny) zabírá teoretický úvod, týkající se výpočtu vibračních spekter, anharmonických korekcí, intenzit vibračních pásů Ramanova rozptylu a Ramanovy optické aktivity a následně metody Fourierovy transformace pro simulaci spekter a autor podle mého názoru prokazuje zvládnutí komplexního teoretického aparátu, použitá metodika je popsána logicky a přehledně. Původními výsledky autora jsou aplikace metody na simulování Ramanových a ROA spekter molekuly fenchonu, porovnání metody Fourierovy transformace se simulacemi získanými pomocí přímé diagonalizace Hamiltoniánu a s experimentálními daty, dále jsou diskutovány výpočetní aspekty týkající se možné paralelizace výpočtu a je odhadnuta velikost Hamiltoniánu, od níž je metoda Fourierovy transformace výpočetně výhodnější než metoda přímé diagonalizace.

K diplomové práci bych měl tyto připomínky:

1) Podrobný popis celého rozsáhlého teoretického aparátu by dalece přesahoval rozsah diplomové práce, a určitá zjednodušení s patřičnými odkazy na literaturu jsou zcela korektní. V některých případech ale veličiny nejsou definovány a odkaz na literaturu chybí: např. na str. 12 není definována matice G , mělo být uvedeno, že matice L je volena tak, aby vztahy pro T a V (2.9-12) bylo možno vyjádřit v diagonální formě. Není vysvětleno, v čem spočívá Teller-Redlichovo pravidlo zmiňované v kapitole 3.4. V kapitole 5.1 je teorie Ramanova rozptylu podána příliš zjednodušeně, v jednom vztahu (5.6) jsou identifikovány členy odpovědné za infračervenou absorpci i za Ramanův rozptyl, i když v prvním případě jde o jednofotonový a v druhém o dvoufotonový proces.

2) Popis ROA experimentu v kapitole 5.4 je více než stručný, výraz „incident laser“ je nesmyslný. Kapitola 5.5 týkající se naměřených spekter logicky nezapadá do teoretické části práce, a byla evidentně napsána v enormním spěchu. Experimentální podmínky jsou nedostatečné, měla být uvedena celková doba akumulace, výkon laseru, vlnová délka budícího záření, použité spektrální rozlišení apod. Není jasné, co je myšleno pojmem „centimeter's cuvette“. Fenchon je „keton“ a ne „katon“. Naměřená spektra jsou nicméně velmi dobré kvality. Důvodem, proč nejsou použita pro srovnání s vypočtenými spektry není (poměrně malé) fluorescenční pozadí, ale fakt, že nebyla měřena oblast valenčních vodíkových vibrací (kolem 3000 cm^{-1}), jak je ostatně správně uvedeno na str. 60.

3) Autor na několika místech rozděluje studovanou spektrální oblast na harmonickou a anharmonickou část (např. str. 52,60). To považuji za poněkud nevhodné, mělo se hovořit např. o oblasti valenčních vodíkových vibrací, oblasti pod 2000 cm^{-1} apod.

4) V práci chybí stručný závěr obsahující dosažené výsledky, závěr by měl být obecně oddělen od diskuze. Bylo by také vhodné vyhnout se hovorovým spojením v diskuzi.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1) Je možné, aby byl pro danou molekulu počet Stokesových a anti-Stokesových pásů rozdílný (Figure 5.2)? Jsou intenzivnější Stokesovy nebo anti-Stokesovy pásy a na které fyzikální veličině jejich intenzitní poměr závisí?

2) Jsou výsledky uvedené v kapitole 7.1 a 7.2 pro dimer vody aplikovatelné i na fenchon?

3) Není zcela jasné, jak autor dospěl ke klíčovému obrázku 7.7 na str. 51. Prosím o vysvětlení, pro kterou molekulu byly výpočty prováděny a kolik vibračních přechodů bylo pro jednotlivé body zahrnuto. Na konci diskuze je uvedeno, že metoda Fourierovy transformace je účinnější pro systémy nad 1000 atomů. Jak k tomuto číslu autor dospěl? Molekula fenchonu obsahuje 27 atomů.

4) Při srovnání s experimentem byla vypočteným vlnočtům přičtena určitá konstanta (tabulka 7.1), rozhodně nejde o „normální proceduru“ jak je uvedeno na str. 52. Obvykle se silové pole (a frekvence) nějakou konstantou násobí. Prosím o vysvětlení použitého postupu.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis oponenta: Olomouc, 19. května 2010