

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

posudek vedoucího
 bakalářské práce

posudek oponenta
 diplomové práce

Autor/ka: **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 vedoucího: **prof. RNDr. Vladimír Baumruk, DrSc.**
Pracoviště: **Fyzikální ústav UK**
Kontaktní e-mail: **baumruk@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:

velký 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:

Molekulární spektra vznikají interakcí molekul s elektromagnetickým zářením a jsou hlavním a často jediným zdrojem informací o struktuře a vlastnostech studovaných systémů. S rozvojem počítačů a metod kvantové chemie je možné modelovat stále složitější systémy a konfrontací s experimentem získat výrazně více informace. Cílem práce měla být aplikace dostupných výpočetních programů pro simulace experimentálních výsledků stejně tak jako vývoj vhodných výpočetních přístupů. Bc. Ivan Ivani se ve své diplomové práci zaměřil na využití relativně nového přístupu k simulaci spekter Ramanova rozptylu a vibrační optické aktivity, který je založen na časové propagaci vlnové funkce následované Fourierovou transformací. Tento přístup nachází uplatnění především při výpočtu spekter velkých molekul, pro něž je přímá diagonalizace Hamiltoniánu těžko proveditelná, nebo při zahrnutí anharmonických efektů.

Jako vedoucí mohu konstatovat, že diplomant stanovené náročné úkoly zvládl a v zásadě splnil. Během jejich řešení projevila píli, samostatnost a potřebnou invenci, zvládl základy vědecké práce, osvojil si pokročilé výpočetní techniky a programy a dokázal se zapojit do problematiky řešené ve spolupráci se skupinou Molekulové spektroskopie na ÚOCHB AV ČR vedené doc. Petrem Bouřem, která souvisí s řešením společného projektu GAAV IAA400550702 „Spektroskopické a teoretické metody pro studium nekovalentních molekulových interakcí“.

Diplomová práce je sepsána v anglickém jazyce, trpí však občasnými formulačními nepřesnostmi a ve výsledkové a diskusní části až přílišnou stručností. Při jejím řešení však byly získány původní výsledky, které byly diplomantem prezentovány formou posteru na 8th Discussions in Structural Molecular Biology v březnu 2010 v Nových Hradech (<http://www.xray.cz/setkani/abst2010/abstracts.htm>). Článek shrnující některé výsledky předkládané diplomové práce (Ivan Ivani, Vladimír Baumruk, a Petr Bouř: A Fourier transform method for generation of anharmonic vibrational molecular spectra) byl zaslán do *Journal of Chemical Theory and Computation* a je v recenzním řízení.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího:

V Praze dne 19. května 2010

