

Posudek doktorské práce
Transport náboje v molekulárních systémech a vliv příměsí
Mgr. Juraje Nožára

Posuzovaná práce je napsána jako přehledný výklad na 159 stranách v anglickém jazyce. V anglickém jazyce se občas vyskytují chyby, nesnižují však celkovou čitelnost textu.

V kapitole 2 je přehledně shrnuta teorie vycházející z kvantové mechaniky, včetně přehledu praktických výpočetních metod.

V kapitole 3 jsou stručně zformulovány cíle práce.

Podrobnému popisu výpočetních metod je věnována kapitola 4.

V kapitole 5 jsou podrobně diskutovány vyšetřované molekuly, jejich struktura a další vlastnosti.

Kapitola 6 obsahuje podrobné shrnutí výsledků autora a jejich diskusi.

Dále následuje shrnutí, literatura, seznam publikací autora a dodatky.

V seznamu prací autora je uvedeno 7 publikací, z toho 4 jsou zaslány do tisku nebo v tisku. Při obhajobě by měl Mgr. Nožár uvést aktuální informace o těchto pracích. Dále je uvedeno 7 příspěvků na mezinárodních konferencích a 4 přednášky.

Celková úprava práce je velmi dobrá.

Větší nedostatky jsem v práci nenašel. Z menších nedostatků bych uvedl např. rovnici (2.3), kde není jasné, v jakých jednotkách je napsána. Práce má velmi dobrou úroveň, výklad je srozumitelný a přehledný. Publikace autora přináší nové a zajímavé vědecké poznatky v daném oboru.

Na práci si cením systematické využití kvantově chemických metod ke studiu přenosu náboje v polymerech. Je dosažena celá řada zajímavých výsledků, které jsou, tam kde je to možné, porovnávány s experimentálními výsledky. Lze mít samozřejmě námitku, že byly zkoumány izolované polymerové řetězce, zatímco v reálném prostředí polymery vždy interagují s okolím. Takové ještě složitější systémy by mohly být předmětem dalších studií.

Celkově se domnívám, že Mgr. Juraj Nožár touto prací prokázal schopnost samostatné tvořivé vědecké práce na požadované úrovni. Navrhuji proto, aby tato práce byla uznána jako podklad pro udělení vědecké hodnosti Ph.D.

V Praze dne 9.3.2011

Prof. RNDr. Lubomír Skála, DrSc.
Matematicko-fyzikální fakulta UK