

Oponentský posudek na disertační práci

Mgr. Juraje Nožára:

Transport náboje v molekulárních systémech a vliv příměsí

Práce se zabývá použitím standardních kvantověchemických metod pro studium transportu náboje na řetězcích polysilanu, vysvětlením fotodegradace jejich řetězců a v neposlední řadě i vysvětlení mechanismu detekce plynů s použitím ftalocyaninových receptorů. Studovaná šíře problematiky je tedy značná a nutno konstatovat, že i poněkud nesourodá.

Práce ve všech částech vykazuje rysy dobře zvládnuté metodiky a doktorand si osvojil rutinní interpretaci kvantověchemických veličin. Samozřejmě nutno vidět, že byl veden především snahou o interpretaci výsledků ve smyslu běžně používaných termínů elektrofyziky polymerů. Ta je ovšem poněkud odlišná od obvyklé kvantověchemické interpretace. Získané výsledky jsou docela zajímavé a je překvapující jejich dobrá, byť někdy i nepřímá shoda s experimentálními měřeními. Tyto skutečnosti jsou vhodně graficky doloženy, nicméně musím konstatovat, že grafy či obrázky jsou tak malé, že čtenář musí víceméně věřit konstatováním v textu bez možnosti vlastního ověření na grafické prezentaci. Práce je metodicky vhodně rozčleněna. Jednotlivé kapitoly jsou podány jasně a přehledně. Po této stránce – tedy obsahové interpretace výsledků – k práci nemám podstatnějších námitek.

Určité pochybnosti bych ovšem vyjádřil k použitým kvantověchemickým metodám, především k jejich teoretické úrovni. Jsem si vědom, že studované systémy polymerních řetězců jsou poněkud rozsáhlé a logicky tím vytváří určitá omezení. Nicméně oligomer s méně než 20 monomerními jednotkami není zase tak rozsáhlý systém, aby neumožňoval rigoróznější a tedy i poněkud věrohodnější zpracování. V současné době není problém požádat o poskytnutí výpočetního času na superpočítačových centrech i mimo Českou republiku a tím tedy limity běžné v ČR snadno překročit. I když by se mohlo zdát, že soulad

teoretických a experimentálních výsledků je dostatečnou validací použité kvantověchemické metody, může to být i poněkud náhodná shoda. Já osobně pokládám použití metod úrovně STO-3G* v současné době za překonané a takto získané výsledky mohou být přinejmenším nevěrohodné. Možná kdyby se doktorand více zabýval pokročilými semiempirickými metodami, např. PM6, dospěl by k názoru, že jejich parametrizace a otestování jsou na takové úrovni, že získané výsledky by byly věrohodnější než v těchto malých neempirických bázích.

Vedle tohoto mého samozřejmě osobního názoru bych se rád vyjádřil i k celkové struktuře předložené práce. Připadá mi poněkud nadbytečné strávit kapitoly – teoretický úvod, výpočetní metody – celkem 63 stran textu, tj. celou jednu polovinu předložené práce. Tyto kapitoly nepřináší nic nového, a pokud tím doktorand chtěl ukázat, že má v této oblasti náležité znalosti, je to nadbytečné, protože je jistě musel prokázat v rámci studia předmětů, které si v doktorandském studiu vybral. Vlastní část práce „výsledky“ by potom mohla být obsažnější, spektrum použitých metod širší a získané výsledky věrohodnější. Naopak v práci zcela postrádám rešeršní část, která by čtenáře seznámila se stavem studované problematiky a definovala tedy východiska, ze kterých práce vychází. Takto nelze poznat, zda-li jde o zcela novou práci i originální použití metodiky, či jde jen o extenzi použití známých metodik, byť i na jiné molekulární systémy.

Celkově práci považuji za dobrý start pro pokračování studia v této oblasti jak ve směru použití vyspělejších metod, tak i ve směru interakce jednotlivých oligomerních řetězců a přenosu náboje mezi nimi. Doporučuji předloženou práci jako podklad k obhajobě a po jejím úspěšném obhájení ve smyslu vyhlášky č. 131/1997 Sb. navrhuji udělit uchazeči vědecko-akademickou hodnost PhD.

V Praze dne: 12. 4. 2011

doc. Ing. Stanislav Böhm, CSc.

Ústav Organické chemie

VŠCHT Praha