

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě

Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor: Vladislav Sláma

Název práce: Samoorganizace a optické vlastnosti malých molekulárních agregátů

Studijní program a obor: Obecná fyzika, Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2013

Jméno a tituly oponenta: Prof. RNDr. Petr Chvosta, CSc.

Pracoviště: Katedra Makromolekulární Fyziky, MFF UK

Kontaktní e-mail: chvosta@kmf.troja.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:

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:

Předkládaná práce se zabývá teoretickým studiem procesu agregace karotenoidů ve vodném roztoku. Výchozí paradigma je následující. Molekula karotenoidu má tvar lineárního řetězce. V hydratovaných polárních rozpouštědlech dochází ke shlukování (agregaci) molekul. Geometrická struktura agregátu implikuje tvar absorpčního spektra. Spektrum vykazuje dvě výrazná maxima. Ta odpovídají dvěma dominantním typům uspořádání molekul v agregátu: H-agregát a J-agregát. Zastoupení jednotlivých typů lze kontrolovat změnou složení roztoku, konkrétně změnou koncentrace vody v acetonu. Změna koncentrace vody tedy způsobí změnu zastoupení každého ze dvou uvedených způsobů agregace a následně změnu vah každého ze dvou maxim v absorpčním spektru.

Centrálním cílem diplomové práce je návrh a analýza teoretického modelu, který by správně popisoval tvorbu agregátů a následně i měřené absorpční spektrum a jeho změny v závislosti na změně koncentrace vody v roztoku.

Nutnou podmínkou ke splnění cílů diplomové práce bylo předběžné zvládnutí pokročilých partií teoretické biofyziky (modelování přenosu excitace), statistické fyziky (výpočet stavové sumy, kvantově-mechanický výpočet korelačních funkcí v metodě lineární odezvy), stochastické geometrie (generace náhodných konfigurací) a numerické matematiky (metoda Monte Carlo).

Na předkládané práci je podle mého názoru cenné především to, že diplomant usiluje o celistvou, vnitřně propojenou posloupnost úvah, vedoucích od výchozí formulace na úrovni Hamiltonova operátoru pro molekulu až po experimentálně měřená spektra. Práce poskytuje v pravém slova smyslu o teoretickou interpretaci výsledků experimentu. Výsledky práce jsou na úrovni standardní vědecké publikace v mezinárodním časopise.

Úkoly diplomové práce byly splněny. Autor má talent k práci v oblasti základního výzkumu v teoretické biofyzice.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

A) Při počítačové simulaci náhodných konfigurací agregátů byly generovány úhly popisující vzájemnou orientaci jednotlivých molekul karotenoidu. Autor předpokládal rovnoměrné (homogenní) rozdělení v určitém intervalu. Jak lze odůvodnit použití homogenního rozdělení a lokalizaci nosiče distribuce? Jaký vliv na konečné výsledky (zejména poloha a tvar modrého maxima) má použití jiné distribuce, například takové, která vykazuje ostře vymezené maximum?

B) Diplomová práce se do značné míry přimyká citované práci „Absorption Spectra of Astaxanthin Aggregates“ autorů Jana Olšiny, Milana Durchana, Babaka Minofara, Tomáše Polívky a Tomáše Mančala. Zde byly agregáty reprezentovány jednoduchými dimery a trimery. Právě značné rozšíření uvažovaných konfigurací agregátů je důležitým, novým a vlastním příspěvkem autora diplomové práce. Lze kvantitativně srovnat výsledky obou přístupů (tj. citované publikace a diplomové práce)? Bylo by možné formulovat explicitní limitní přechod, v jehož rámci by se výsledky diplomové práce redukovaly na výsledky uvedené publikace?

C) Existují v rámci uvažované množiny konfigurací také ty, které jsou z fyzikálního hlediska neuskutečnitelné a představují tedy artefakt simulačního přístupu? Jakou váhu a jaký vliv na spektra mají tyto případné konfigurace?

D) Lze množinu konfigurací parametrizovat ještě jiným způsobem a vyloučit tak nerealistické konfigurace? Jedna taková parametrizace by mohla zahrnout agregáty libovolného počtu molekul za cenu zúžení množiny možných orientací molekul v daném agregátu. Střední počet molekul v agregátu by potom byl výsledkem simulací a nikoliv vstupním parametrem. Jaký je názor autora diplomové práce na takovou možnost?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně **velmi dobře** **dobře** **neprospěl/a**

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze dne 20. Května 2013

Prof. RNDr. Petr Chvosta, CSc.