

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 vedoucího/opponenta: RNDr. Tomáš Mančal, PhD.

Pracoviště: Fyzikální ústav UK

Kontaktní e-mail: mancal@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:

- 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 vedoucího/opponenta:

Předkládaná práce se zabývá agregací karotenoidů v roztocích s různým obsahem vody a je motivována experimenty provedenými na Jihočeské univerzitě, ve kterých nastávají při rostoucích koncentracích vody v roztoku s konstantním podílem karotenoidů komplikované posuny maxima absorpce. Cílem práce bylo ověřit myšlenku, že za změnami spekter stojí čistě hydrofobní interakce karotenoidů (simulovaných jako tuhé válce) s roztokem a excitonová interakce mezi tzv. S_2 stavy karotenoidů. Základním vstupem pro výpočty spekter na základě excitonového modelu je struktura agregátů a síla interakce mezi jednotlivými molekulami. Řešitel důkladně promyslel hlavní interakce účastníci se formace agregátu a provedl Monte-Carlo simulace agregace. Pro výpočet rezonanční interakce mezi dvěma karotenoidy bylo společně s vedoucím vypracováno klasické přiblížení založené na představě klasických elektronových normálních modů řetízku atomů s pi-elektrony. Většina ostatních originálních příspěvků práce padá plně na vrub řešitele. Práce potvrzuje původní myšlenku pro případ vysokých koncentrací vody v roztoku, kdy se tvoří velké agregáty, a nastává posun spektra do vyšších frekvencí. Pro nízké koncentrace vody se nepodařilo získat výsledky odpovídající experimentu, což je pravděpodobně způsobeno přílišnou jednoduchostí modelu.

Řešitel se zhostil práce velmi samostatně a aktivně a prokázal značné schopnosti v obcházení slepých uliček a vyvíjení vlastního aparátu k uchopení problematiky. Úspěšně zkombinoval několik přístupů k problému a zejména je třeba ocenit snahu o analytické výsledky, která provázala úspěšné použití výpočtu standardizovanými programy.

Jedinou výhradou, kterou mám je, že se v seznamu literatury objevuje jisté zvýšení koncentrace překlepů. Považuji to ale pouze za lokální fluktuaci. Práci jednoznačně doporučuji uznat jako diplomovou.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze, 19. 5. 2013, Tomáš Mančal