

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího       posudek oponenta  
 bakalářské práce       diplomové práce

Autor/ka: Bc. Martina Zámečnicková

Název práce: *Study of Biological Systems in Electronically Excited States*

Studijní program a obor: Fyzika, biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2014

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Ota Bludský, RNDr. CSc.

Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i.

Kontaktní e-mail: ota.bludsky@uochb.cas.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/oponenta:**

Předložená diplomová práce se zabývá dynamikou excitovaných stavů dimeru N-methylformamidu v komplexu s molekulami vody, který slouží jako model pro interakce bází v molekulách nukleových kyselin. Hlavním výsledkem práce je zjištění, že delokalizace stavů v těchto systémech je způsobena přítomností molekul vody.

Úvodem je nutno říci, že diplomová práce Martiny Zámečnickové splňuje všechna kritéria kvalitní vědecké studie. Vysoce hodnotím zejména zvládnutí náročné metodiky a pečlivost, s jakou bylo provedeno testování použitých výpočetních metod. Práce obsahuje detailní srovnání kvantově-chemických metod, které mohou být reálně použity k výpočtům elektronicky excitovaných stavů komplexních molekulových systémů. Neadiabatická dynamika je v této práci řešena v rámci „surface hopping“ přístupu. Z formálního hlediska je práce sepsána v anglickém jazyce na velmi dobré úrovni, v první části jsou popsány použité výpočetní metody a druhá část obsahuje souhrn dosažených výsledků. Práce obsahuje několik nepřesností, zejména v úvodní metodické části. Například diskuze výběrových pravidel pro  $n \rightarrow \pi^*$  a  $\pi \rightarrow \pi^*$  přechody (str. 15) platí pouze pro některé molekuly (formaldehyd), aniž je to v textu uvedeno. Čtenář pak může nabýt dojmu, že  $n \rightarrow \pi^*$  přechody jsou obecně zakázané a  $\pi \rightarrow \pi^*$  přechody povolené, ačkoliv pro mnohé systémy je tomu právě naopak. Rovněž nelze souhlasit s tvrzením na str. 18, že adiabatické stavy jsou vlastními stavy hamiltoniánu (1.0.4). Tyto drobné nepřesnosti v úvodu jsou však vyváženy mimořádně kvalitní výsledkovou částí práce, obsahující řadu velmi zajímavých poznatků. Očekávám, že reportované výsledky budou publikovány v některém z vysoce impaktovaných odborných časopisů.

Závěrem mohu konstatovat, že diplomová práce Martiny Zámečnickové je na velmi vysoké formální i odborné úrovni, a proto ji bezvýhradně doporučuji k obhajobě s hodnocením „výborně“.

## **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

V práci je studována interakce v excitovaných stavech  $n \rightarrow \pi^*$  charakteru. Uvádíte, že rozsah interakce a delokalizace významně závisí na typu přechodu. Jaké chování excitovaných stavů se dá očekávat pro interakci stavů  $\pi \rightarrow \pi^*$  charakteru a za situace, kdy jeden monomer je  $\pi \rightarrow \pi^*$  a druhý  $n \rightarrow \pi^*$ ? Jak se tyto interakce mohou projevat v molekulách nukleových kyselin, kterými byla tato studie motivována?

**Práci** doporučuji nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:** výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta:

Praha, 28.4. 2014