

Posudek na diplomovou práci Bc. Radima Cajzla:

„Studium elektronových přeskoků v systému barviv fotosystému metodami kvantové mechaniky. Simulace absorpčních a emisních fotoelektronových spekter.“

Pan Radim Cajzl začal pracovat na katedře chemické fyziky a optiky ve 4. ročníku svého studia. Postupně zvládl potřebné nástroje kvantové chemie, které bylo nutno použít k výpočtům různých energetických příspěvků a k analýzám vlnových funkcí studovaných komplexů.

Jeho úkolem bylo studovat elektronová spektra nenasycených konjugovaných uhlovodíků metodami statické kvantové chemie a dynamického přístupu, kde mimo klasické molekulární dynamiky jader je řešena v jednotlivých krocích úloha stanovení elektronových hladin a vypočítána pravděpodobnost přeskoků mezi nimi. Diplomant se díky své iniciativě a pracovitosti zhostil zadané úlohy mimořádným způsobem. Samostatně provedl systematický průzkum aktivního prostoru molekulových orbitalů a našel možnost jak zredukovat tento prostor tak, aby bylo možno s minimální výpočetní náročností studovat uhlovodíkové řetězce až do systémů s 22 uhlíky. Přitom však zůstalo zachováno správné (experimentálně známé) pořadí nejnižších excitovaných stavů.

Krom tohoto `diplomového` projektu Radim úspěšně pracoval na dalších dvou úlohách: Stabilita chinonových komplexů s rutheniem a reakční mechanismus záměny Ru-O chinonové koordinace za molekulu vody. A studium interakci cisplatiny s oligomerním modelem DNA kombinovaným QM/MM přístupem, kde se mu podařilo sestavit téměř kompletní energetický povrch (reakční koordinátu) dvoukrokového mechanismu tvorby platinového můstku, včetně transitních struktur.

Diplomovou práci sepsal Radim samostatně po nastudování potřebné odborné literatury. Její grafická úprava je na velmi dobré úrovni s minimálním počtem překlepů a jiných formálních chyb.

Na závěr je nutno konstatovat, že Bc. Radim Cajzl studoval po celou dobu s dobrým prospěchem a krom studia matematického modelování má i hluboké vědomosti v oblasti chemické fyziky a biofyziky.

Rovněž jeho znalost výpočetní techniky, operačního systému linux a jeho nástrojů je na velmi vysoké úrovni.

Diplomovou práci navrhuji klasifikovat jako výbornou.

V Praze 25.5. 2017

prof. Jaroslav Burda, DrSc.