

Věc: Posudek vedoucího disertační práce

Kandidát: Mgr. Ondřej Krejčí

Název práce: DFT simulations of interaction of organic molecules with oriented surfaces

Rok odevzdání: 2017

Mgr. Ondřej Krejčí zahájil Ph. D. studium roku 2013 a navázal tak na práci diplomovou, bakalářskou a studentský projekt řešený ve skupině tenkých vrstev (r. 2009). Jeho studium bylo specifické svojí orientací na teoretické výpočty a simulace na pracovišti zaměřeném experimentálně. S náročnou problematikou rychle se vyvíjející techniky DFT výpočtů byl seznamován Pavlem Jelínkem z FZÚ, AV ČR, v jehož skupině i během studia působil. Zapojoval se tedy do projektů z více pracovišť, což prospělo šíři jeho fyzikálního záběru.

Disertační práce je pojata jako komentovaný soubor šesti publikací z uznávaných časopisů s obecným úvodem, který umožňuje orientaci čtenáře jak v experimentální, tak teoretické části obsahu. V prvních dvou kapitolách je podán popis DFT výpočtů s nezbytnou teorií a stručné vysvětlení principu experimentálních technik, jejichž výstupy Ondřej Krejčí simuluje v samotné práci (STM, AFM, NEXAFS, XAS, XES). Kapitoly 3-8 postupně otiskují publikace, na kterých je kandidát autorem nebo spoluautorem, vždy s úvodem do specifické problematiky a se zasazením do celkového kontextu práce.

Tématicky je práce orientována na problematiku interakce organických molekul s povrchy (kap. 3, 4, 6 a 8), témata zbylých kapitol jsou blízkce související, v souladu se zadáním práce. Za stěžejní považují simulace STM/AFM na organických molekulách s využitím funkcionalizovaných hrotů. Vzhledem k tomu, že obsahem práce není jen samotná interpretace experimentálních výsledků, ale i vývoj simulačních technik, jsou výsledky bezpochyby významným přínosem pro vědeckou komunitu. Cíle práce tedy považují za splněné.

Ondřej Krejčí prokázal schopnost samostatné vědecké práce i spolupráce v rámci několika výzkumných skupin (FZÚ, MFF, Stockholm University) na mezinárodní úrovni. Výsledky kandidát průběžně úspěšně prezentoval na mezinárodních konferencích především formou přednášek.

Závěrem hodnotím úroveň disertační práce po všech stránkách jako velmi vysokou. Doporučuji, aby byl kandidátovi po úspěšné obhajobě udělen titul Ph.D.

V Praze dne 13.11.2017

doc. RNDr. Pavel Kocán, Ph.D.

školitel