

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího x posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Daniel Herman

Název práce: Influence of intra-molecular vibrational modes on excitation energy transfer in molecular aggregates

Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika, FBCHPT

Rok odevzdání: 2023

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: doc. Mgr. Jaroslav Zamastil, PhD.

Pracoviště: KCHFO

Kontaktní e-mail: zamastil@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/oponenta:

Předložená diplomová práce se zabývá řešením řídicí rovnice pro matici hustoty popisující přenos energie v molekulových agregátech. Práce se snaží vyhnout se obvyklým přiblížením vedoucí na Redfieldovu rovnici.

Práci hodnotím celkově jako velmi zdařilou, nikoliv však bez drobných výhrad.

Jako člověk, který v daném oboru nepracuje bych např. uvítal diskusi toho, proč z hlediska experimentu je Redfieldova rovnice nedostačující a jaký vliv na měřitelné veličiny by mělo vzetí zpětné vazby systému na lázeň, kterou uvažuje autor. Na jakých časových škálách se efekt zpětné vazby projeví? Dále autor zdůrazňuje rozdíl mezi konečnou a nekonečnou lázní. Chybí mně zde diskuse toho, při jaké velikosti konečné lázně se lázeň chová jako nekonečná. V přibližných kvantově-mechanických výpočtech vždy pracujeme s konečnou bazí, přesto jsme často schopni vidět co je efekt konečné báze a co nikoliv. Jsem si vědom toho, že výpočetní potíže jsou enormní, přesto si myslím, že alespoň řádový odhad pro jakou velikost lázně už výsledky nejsou citlivé na velikosti lázně, by byl na místě.

I po formální stránce má práce některé drobné nedostatky. Odkazy na rovnice jsou občas v závorkách, občas nikoliv, angličtina by občas mohla být lepší a některé rovnice jsou zjevně špatně (např. rovnice 1.2, 1.22).

Přes tyto dílčí výhrady se však podle mého názoru jedná o vynikající diplomovou práci.

Množství aktivně ovládnutých znalostí a množství odvedené práce je opravdu velké a i celkové zpracování nese punc profesionality.

Autorův příspěvek pokládám za významný a doufám, že bude ve svém výzkumu dále pokračovat.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze

Uvítal bych pokud by autor naznačil možné důsledky své práce pro veličiny, které jsou experimentátoři schopni měřit.

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta: Praha, 1.2. 2023