

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Tomáš Grycz
Název práce: Dynamické simulace a výpočty elektronových spřažení pro interpretaci ultrarychlé spektroskopie excitovaných Re komplexů
Studijní program a obor: Fyzika
Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: Mgr. Filip Šebesta, Ph.D.
Pracoviště: Katedra chemické fyziky a optiky, MFF UK
Kontaktní e-mail: filip.sebesta@matfyz.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:

Pan Tomáš Grycz ve své bakalářské práci srovnával parametry ovlivňující rychlost elektronových přechodů mezi tripletními stavy u dvou excitovaných donor-akceptorových rheniových komplexů, které byly syntetizovány během posledních tří let a jsou v současnosti charakterizovány pomocí pokročilých spektroskopických metod. Tyto parametry byly určeny na základě klasických molekulárních simulací, kvantově-chemických výpočtů i moderní hybridní QM/MM metody spojující obě techniky. Student používané metody velmi rychle pochopil i přes jejich velký rozsah a implementaci v několika různých programech (Gaussian16, Q-Chem, Turbomole 7.5 a Amber18, VMD) a byl schopen po krátkém čase provádět výpočty samostatně jen s drobným vedením. Porozumění zmíněným výpočetním metodám mu nakonec umožnilo simulovat vývoj uvažovaných tripletních stavů i se zahrnutím explicitního rozpouštědla na krátkých časových úsecích. Práce navíc vyžadovala využití výpočetních klastrů s operačním programem Linux, které si velmi rychle osvojil i díky předchozím projektům na katedře chemické fyziky a optiky. Automatizaci a analýzu výpočtů byl schopen provést díky svým znalostem skriptovacího jazyku Python a analýzy dále samostatně rozvíjel. Veškeré úkoly vypracovával velmi svědomitě. Díky jeho péči bylo dosaženo velkého množství originálních výsledků, které budou využity v připravovaném článku. Celkově pro vypracování bakalářské práce, pochopení experimentálních dat a interpretaci výsledků byla nutná hlubší znalost kvantové chemie, statistické fyziky, skriptování nebo programování a porozumění základnímu popisu přenosu elektronu a pan Tomáš Grycz jich dosáhl.

Samotnou práci sepsal samostatně a přehledně na základě nastudované literatury. Použité výpočetní metody a postupy jsou dostatečně popsány a doplněny schémata. Grafická úprava je na dobré úrovni.

Bakalářskou práci navrhuji klasifikovat jako výbornou.

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 dne 12. 6. 2024

Filip Šebesta