

Posudek vedoucího diplomové práce

Název: Molekulární systémy – počítačové modelování optických vlastností
Autor: Bc. Michal Herčík
Vedoucí DP: doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.
Oponent DP: RNDr. Jiří Lipovský, Ph.D.

Diplomant si pro svou diplomovou práci vybral téma z oblasti teoretické fyziky, a to modelování absorpčních a fluorescenčních spekter jednoduchých molekulárních systémů. Téma je zajímavé z toho důvodu, že molekulární systémy podobné velikosti se vyskytují v některých organismech, které mají schopnost fotosyntézy, konkrétně ve fotosyntetických bakteriích. Podobné výpočty lze proto využít k modelování spekter takových systémů a porovnáním s výsledky experimentu upřesňovat jejich strukturu, sílu interakce, vliv prostředí atd.

Práce je rozdělena na tři části. V první, teoretické části, autor stručně popisuje děje probíhající při fotosyntéze, vysvětluje základní pojmy jako světlosběrný systém, světlosběrná anténa, uvádí pigmenty, ze kterých jsou složeny. Dále se zabývá spektry, speciálně absorpcí a stacionární fluorescencí a uvádí model, v rámci kterého je možné tato spektra modelovat.

Druhá část je věnována programu pro výpočet spekter. Diplomant se v ní zabývá hlavně numerickým výpočtem nevlastních integrálů z oscilujících funkcí, neboť optimalizace této části programu podstatně přispívá ke zkrácení doby celého výpočtu.

Třetí, praktická část práce, obsahuje výsledky výpočtů pro několik konkrétních molekulárních systémů. Je zde také porovnáno použití metod integrace popsanych ve druhé části práce.

Hodnocení práce:

Po formální stránce má práce dobrou úroveň s malým počtem překlepů a pravopisných chyb. Kladně hodnotím to, že se diplomant pustil do práce na tématu z oblasti teoretické fyziky. Musel získat nové znalosti o fotosyntéze a fotosyntetických systémech, ale musel také porozumět teorii související s matematickým modelem použitým pro výpočty, tj. rozšířil si znalosti z kvantové fyziky a částečně i ze

statistické fyziky a fyziky otevřených systémů. Největší přínos vidím v optimalizaci použitého programu, což podstatně zkrátilo dobu výpočtu spekter.

Celkové hodnocení:

Práce splňuje požadavky kladené na diplomovou práci. Doporučuji ji proto k obhajobě a navrhuji hodnocení výborně (A).

V Hradci Králové 19.8.2020

doc. RNDr. Pavel Heřman, Dr.