

Posudek oponenta 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.

Stručná charakteristika:

Práce se zabývá modelováním optických vlastností jednoduchých molekulárních systémů a dalším využitím při studiu fotosyntézy. V úvodní části autor popisuje teorii fotosyntézy a fluorescence včetně příslušného modelu hamiltoniánu. Hlavním přínosem práce je úprava kódu v jazyku Fortran, pomocí kterého lze určit absorpční a fluorescenční spektra jednoduchých systémů. Aby tuto úpravu mohl provést, musel nastudovat netriviální matematické metody numerického výpočtu integrálu z oscilující funkce, které diplomant popisuje ve druhé kapitole. V poslední kapitole pak popíše program a představí obdržené výsledky. Rozsah práce je dostatečný, práce má 60 stran.

Hodnocení:

Oceňuji pečlivost, se kterou je psána zejména úvodní kapitola, která je čtivá a všechny pojmy (často netriviální) jsou dobře vysvětleny. Diplomant využívá svých fyzikálních znalostí a vysvětluje jevy s tématem spojené z pohledu fyziky. Také popis parametrů programu a podprogramů je detailní a napsaný tak, že čtenář snadno pochopí základní myšlenky.

V praktické části diplomant svou změnou kódu dosáhl znatelného snížení doby výpočtu u složitějších systémů, ačkoliv pro nejjednodušší systém není nová metoda použitelná. K popisu dosažených výsledků také nemám výtky.

V práci se objevuje určité množství překlepů a drobných typografických chyb, které bylo možné odstranit. Faktické chyby se téměř nevyskytují, všiml jsem si pouze nesprávného označení barev šipek v popisu obr. 1.2.

Výsledek práce je cenný zejména tím, že výrazně optimalizuje výpočet spekter systému a pomůže tak v dalším výzkumu.

Závěr hodnocení a návrh klasifikace:

Předložená práce splňuje požadavky kladené na diplomové práce. Autor prokázal, že je schopný samostatné práce. Doporučuji proto práci k obhajobě a v případě uspokojivého zodpovězení otázek navrhuji známku **A**.

Konkrétní dotazy k obhajobě:

1. Vysvětlete, co je singletní stav a tripletní stav z pohledu kvantové mechaniky a spinu.
2. Jaký je rozdíl mezi napierovským absorpčním koeficientem a lineárním absorpčním koeficientem? Definice vycházející z rovnic (1.3) a (1.4) na str. 19 jsou stejné.
3. Na str. 28 udáváte hodnotu excitační energie pro bakteriochlorofyl B850 jako $1,22 \cdot 10^4 \text{ cm}^{-1}$. Tato energie podle (2.1) odpovídá vlnové délce 820 nm. Vysvětlete rozdíl oproti označení bakteriochlorofylu.

V Černvíře 17. 8. 2020

RNDr. Jiří Lipovský, Ph.D.