

Posudek oponenta diplomové práce

Příjmení a jméno studenta:	Kužela Tomáš
Studijní program:	Chemie a technologie materiálů
Studijní obor:	Materiálové inženýrství
Zaměření (pokud se obor dále dělí):	
Ústav:	ÚFMI
Vedoucí diplomové práce:	RNDr. Marek Ingr, Ph. D.
Oponent diplomové práce:	RNDr. Eva Kutálková, Ph. D.
Akademický rok:	2019/2020

Název diplomové práce:

Studium fluorescenčních spekter substituovaných terthiofenů metodami kvantové chemie

Hodnocení diplomové práce s využitím klasifikační stupnice ECTS:

Kritérium hodnocení	Hodnocení dle ECTS
1. Splnění zadání diplomové práce	A - výborně
2. Formální úroveň práce, včetně jazykového zpracování	A - výborně
3. Množství, aktuálnost a relevance použitých literárních zdrojů	A - výborně
4. Popis experimentů a metod řešení	A - výborně
5. Kvalita zpracování výsledků	A - výborně
6. Interpretace získaných výsledků a jejich diskuze	A - výborně
7. Formulace závěrů práce	A - výborně

Předloženou práci **doporučuji** k obhajobě a navrhuji hodnocení

A - výborně

Komentáře k diplomové práci:

Cílem předložené práce bylo interpretovat absorpční a fluorescenční spektra molekul terthiofenu se dvěma typy substituentů (methylkarboxylát, oligoethylenoxid) pomocí kvantověchemických metod. Nejprve byly stanoveny dihedrální úhly popisující vzájemné otočení thiofenových jader molekuly ve vakuu, a to pro základní a první excitovaný stav. Poté byla pomocí nástrojů klasické molekulové dynamiky molekula terthiofenu solvatována molekulami vody, parametry simulace byly porovnány s kvantověchemickými výpočty a následně vytvořené optimalizované silové pole bylo použito ke klasické simulaci molekuly ve vodném prostředí. Ukázalo se, že dihedrální úhly popisující vzájemnou polohu thiofenových jader se přechodem z vakua k vodnému prostředí významně změnily. Aby bylo možné simulovat i chování v prvním excitovaném stavu molekuly, byly na základě srovnání klasicky a kvantově počítaných interakcí molekuly s vodou upraveny parciální náboje na molekule terthiofenu. Také potenciál dihedrálních úhlů mezi thiofenovými jádry byl opět optimalizován tak, aby celkový potenciál molekuly byl v dobré shodě s potenciálem kvantověchemickým. Pro nejčastější konfigurace studovaných molekul vzešlé z molekulové dynamiky potom byly stanoveny energie prvního excitovaného stavu i stavu základního. Následně vypočtená absorpční a fluorescenční spektra molekuly terthiofenu s oligoethylenoxidovými substituenty ve vodném prostředí byla porovnána s experimentálně naměřenými spektry. U absorpčního spektra byla shoda výborná, i fluorescenčního dobrá.

Práce je velmi obsáhlá, přehledně členěná, cíle jsou jasně formulované a závěry logicky plynou z prezentovaných dat. Oceňuji především velké množství odvedené práce a schopnost dílčí výsledky smysluplně propojit a data srozumitelně interpretovat. Moje připomínky jsou proto především formálního rázu. Nelíbí se mi zavedení zkratk pro často používaná sousloví už v abstraktu.

Teoretická část trpí jistou nevyvážeností – v pojednání o kvantové chemii jsou podrobně popsány i metody v práci nepoužité, naproti tomu u molekulové dynamiky a popisu interakce záření s látkou se autor spokojil se základními principy. Pečlivější závěrečná revize textu by jistě odstranila ojedinělé nejasné, resp. kostrbaté formulace (např. 33⁸⁻¹³; 46_{8,9}), nesrovnalosti v definici dihedrálního úhlu α na str. 64_{5,6} nebo chybný popis hodnot dihedrálních úhlů v textu za obrázky 39 a 40. Uvítala bych také přesunutí obrázku 32 ze strany 74 na stranu 65, kde jsou dihedrální úhly určující natočení substituentů definovány. Je trochu škoda, že nezbyl čas na výpočty pro více konfigurací studovaných molekul, především u kompletního terthiofenu, což by emisní spektrum značně zpřesnilo. Na druhou stranu, tyto drobné připomínky předloženou práci, která je nadstandardně obsáhlá a jako celek působí výborným dojmem, podstatně nesnižují.

Práci doporučuji k obhajobě a hodnotím ji stupněm A – výborně.

Otázky oponenta diplomové práce:

bez otázek

Ve Zlíně dne 25. 05. 2020

Podpis oponenta diplomové práce