



Posudok na diplomovou práci Bc. Kamila Kotrleho s názvom „Magnetické vlastnosti vícejaderných a polymerních koordinačních sloučenin lanthanoidů“

Cieľom predloženej diplomovej práce Bc. Kamila Kotrleho bolo pripraviť nové koordinačné zlúčeniny hlavne Dy(III) a Gd(III), ktoré by vykazovali buď chovanie jednomolekulových magnetov alebo by sa dali využiť ako chladivá vďaka magnetokalorickému javu. Preto sa v teoretickej časti práce zamerlal na sumarizáciu dôležitých poznatkov v týchto oblastiach. Ďalej vykonal literárnu rešerš zameranú na nanomagnety Dy(III) s veľkými hodnotami energetickej bariéry charakterizujúcej tieto materiály, a vykonal aj rešerš zlúčenín Gd(III) vykazujúcich magnetokalorický jav.

V experimentálnej časti práce uvádza postupy prípravy vybraných koordinačných zlúčenín a výsledky ich charakterizácie pomocou dostupných fyzikálno-chemických metód, pričom v šiestich prípadoch sa podarilo štruktúrne charakterizovať zlúčeniny Dy(III) a tri z nich pripraviť ako chemické indivídua v dostatočnom množstve pre magnetické meranie. Tie preukázali chovanie jednomolekulových magnetov. Okrem toho sa študoval magnetokalorický jav pre trojjadrový komplex Gd(III), kde bola dosiahnutá významná hodnota zmeny magnetickej entropie v danej skupine látok. Tým boli ciele práce splnené.

Nad rámec zadania diplomovej práce sa významne podieľal na teoretickej interpretácii vlastností týchto látok, samostatne analyzoval výsledky CASSCF výpočtov, samostatne vykonal DFT výpočty a použil ich pre výpočet parametrov kryštálového poľa pomocou programu SIMPRE a tzv. REC modelu. Samostatne vykonal aj analýzu magnetických dát pre komplexy Dy(III).

Záverom, chcem veľmi oceniť autorovu pracovitosť v experimentálnej časti práce, ale hlavne jeho aktívny prístup k vyhodnocovaniu vlastností pripravených zlúčenín pomocou teoretických metód. Preto jeho prácu jednoznačne odporúčam k obhajobe.

Hodnotenie: A

Olomouc, 16. 5. 2018

doc. Ing. Radovan Herchel, PhD.