

Posudek diplomové práce Bc. Adély Gottwaldové

„Kvantově-chemické studium struktury a spektrálních vlastností koordinačních sloučenin manganu a železa vykazujících křížení spinových stavů“

Diplomová práce Bc. Adély Gottwaldové se zaměřuje na studium struktury a spektrálních vlastností koordinačních sloučenin železa a manganu vykazujících efekt křížení spinových stavů. Úkolem diplomantky bylo především analyzovat pomocí metod teoretické chemie vztah mezi geometrickými charakteristikami koordinační sféry vybraných komplexních sloučenin a uspořádáním elektronové struktury a jeho možnými změnami.

Diplomová práce je dělena standardním způsobem na kapitoly *Úvod*, *Teoretická část*, *Experimentální část*, *Výsledky a diskuze*, *Závěr*, *Přehled použité literatury* a *Přílohy*.

Teoretická část je členěna na tři podkapitoly. První z nich, nazvaná *Křížení spinových stavů koordinačních sloučenin*, je věnována samotnému jevu křížení spinových stavů (SCO), popisu mechanismů, kterými elektronové přechody probíhají, a nalezneme zde také přehled vybraných koordinačních sloučenin železa a manganu vykazujících SCO. Druhá podkapitola, *Metody kvantové chemie*, se zabývá základním popisem v současné době používaných metod teoretické chemie. Třetí, a z hlediska zadání práce nejdůležitější podkapitola – *Struktura: funkční vztahy v látkách vykazujících SCO*, se věnuje strukturním parametrům majícím zásadní vliv na charakter SCO efektu. Celá *Teoretická část* je zpracována přehledně a s ohledem na náročnost probírané problematiky i čtivě.

V *Experimentální části* diplomové práce autorka zbytečně stručně seznamuje čtenáře s metodami, které ke svému výzkumu použila. Představeny jsou také koordinační sloučeniny, které byly výzkumu podrobeny. Součástí kapitoly jsou rovněž tabulky obsahující analyzovaná data, tedy vybrané vazebné délky, vazebné úhly a parciální náboje. Přehlednost a srozumitelnost tabulek je poněkud narušena nepřiliš vhodným značením jednotlivých „výpočtů“ a jejich výsledků. Vysvětlení sice lze nalézt částečně v kapitole *Výsledky a diskuze*, částečně v kapitole *Seznam použitých zkratk a symbolů*, pro nezasvěceného čtenáře se ovšem jedná o poměrně velkou a hlavně zbytečnou komplikaci.

Kapitola *Výsledky a diskuze* analyzuje získaná data ze dvou základních hledisek. Prvním z nich je porovnání vybraných vlastností nízkospinové a vysokospinové formy studovaných sloučenin. Druhým hlediskem je potom vliv výpočetní metody na hodnoty sledovaných parametrů. Stejně jako předchozí kapitola jsou i *Výsledky a diskuze* postiženy nepřehledným

značením koordinačních sloučenin i teoretických experimentů, které byly prováděny. Při pozorném čtení textu se nicméně lze dobrat podstaty věci.

Kapitola *Závěr* stručně a přehledně sumarizuje a zobecňuje výsledky získané v rámci řešení diplomové práce. Kapitola *Literatura* je souborem 69 literárních zdrojů, ze kterých autorka jednak vycházela při zpracování literární rešerše, a jednak získala experimentální data pro svůj vlastní výzkum. Diplomovou práci uzavírá již zmíněný *Seznam použitých zkratek a symbolů* a *Přílohy* obsahující atomové souřadnice všech studovaných molekul.

Závěrem lze říci, že se autorce podařilo úspěšně splnit podstatné cíle formulované v zadání diplomové práce. Je třeba zdůraznit, že studentka zpracovávala pro ni zcela novou problematiku, velmi náročnou jak po stránce teoretického i experimentálního popisu studovaného jevu, tak i po stránce metodické. Rád bych také vyzdvihnul vyvinuté pracovní úsilí. Předložená práce tedy dle mého názoru splňuje kritéria kladená na diplomové práce chemických oborů na PřF UP v Olomouci, a proto ji **doporučuji** k obhajobě a navrhuji hodnocení

V Olomouci 22. 8. 2016

doc. RNDr. Michal Čajan, Ph.D.