



KATEDRA ANORGANICKÉ CHEMIE
PŘÍRODOVĚDECKÁ FAKULTA, UNIVERZITA PALACKÉHO V OLOMOUCI

17. listopadu 12, 771 46 Olomouc; tel.: +420 585 634 351, fax: +420 585634357
e-mail: agch@upol.cz, <http://agch.upol.cz>

Posudek diplomové práce Bc. Nely Žitníkové

**„Kvantově-chemické výpočty parametrů Mössbauerových spekter
vybraných koordinačních sloučenin železa“**

Diplomová práce Bc. Nely Žitníkové byla zaměřena na validaci publikované metodiky výpočtu základních parametrů Mössbauerových spekter, izomerního posunu a kvadrupólového štěpení. Úkolem diplomantky bylo analyzovat vliv geometrických deformací molekulární struktury na hodnoty obou uvedených parametrů v případě koordinačních sloučenin železa. Za tímto účelem byla vybrána série komplexů železa s experimentálně určenou molekulovou strukturou i experimentálně změřenými hodnotami obou výše uvedených parametrů. Molekulové struktury komplexů byly dále optimalizovány na úrovni metod HF a DFT. Pro molekulové geometrie získané všemi třemi postupy potom byly vypočítány Mössbauerovské parametry, a získané hodnoty byly porovnány s hodnotami experimentálními. Vzhledem k zaměření výzkumu Katedry anorganické chemie PřF UP v Olomouci měla tato práce za primární cíl posoudit na typově širší škále komplexních sloučenin železa kvalitu Mössbauerovských dat poskytovaných testovanými teoretickými metodami, a případně navrhnout jejich možná zpřesnění.

Název diplomové práce může evokovat dojem řešení náročných teoretických problémů. V zásadě se však jednalo spíše o rutinní aplikaci zavedených postupů v rámci uživatelsky nenáročných programových prostředí. To samo o sobě nikterak nesnižuje její úroveň, protože nutnost prověřování správnosti informací poskytovaných experimentálními i teoretickými fyzikálními a fyzikálně chemickými metodami zkoumání hmoty je nepochybná. Přesto je třeba na úvod vlastního hodnocení uvést, že celá práce, a to jak z hlediska průběhu, tak i z hlediska její finální podoby, byla negativně poznamenána nedostačující kvantitou i kvalitou diplomantčiných chemických a obecně přírodovědných znalostí, jakož i zásadními problémy při práci s odbornou literaturou. Tyto skutečnosti se již na první pohled odráží v úrovni

rešeršní části, kterou diplomantka zpracovávala více než tři roky bez zásadnějšího kvalitativního posunu. Příkladem budiž kapitola 2.1.5 *Metody řešení struktury koordinačních sloučenin*. Kromě toho, že je její obsah prakticky identický s částí úvodu k diplomové práci, přináší je velmi povrchní a zavádějící informace. Diplomantka by v diskusní části obhajoby práce měla tvrzení v této kapitole uvedená podrobněji vysvětlit.

Vlastní výzkumnou práci ovlivnilo časté nesprávné nakládání s chemickými vzorci i chemickými názvy, nebo snad jeho neznalost, kdy značné procento provedených výpočtů muselo být, i opakovaně, revidováno. To vše zpravidla jen proto, že diplomantka chybně vyhodnotila složení studovaných systémů, oxidační a spinový stav centrálního atomu, a v důsledku toho i náboj a multiplicitu studovaných komplexních částic.

Závěrem je třeba zopakovat, že většina odborných nedostatků práce byla způsobena neznalostmi, které by si student posledního ročníku magisterského studia chemie neměl dovolit. Vzhledem k délce řešení diplomové práce přitom vědomosti mohly být průběžně doplňovány, na což také byla diplomantka upozorňována. Absence širšího fyzikálního i chemického rozhledu nakonec neumožnila ze získaných dat vyvodit obecnější, a především dále použitelné závěry. I přes výše uvedené diplomovou práci doporučuji, byť s velkými rozpaky, k obhajobě. Navrhuji hodnocení **E**.

V Olomouci 20. 8. 2013

doc. RNDr. Michal Čajan, Ph.D.