

# Oponentský posudek

diplomové práce na téma

## Využití kvantových simulací pro charakterizaci stability organických extrakčních ligandů

vypracované Bc. Jakubem Luštincem

Diplomová práce Bc. Jakuba Luštince se zabývá stabilitou diglycolamidových (DEG) molekul, jejichž varianty se používají ke zpracování jaderného vyhořelého paliva.

Práce začíná uvedením do problematiky ab-initio výpočtů elektronové struktury molekul, se zaměřením na DFT a diskuzi různých bází a výměnných potenciálů. Stručně je také zmíněna teorie vázaných klusterů. Úvod pokračuje zavedením vlastností molekul důležitých pro jejich stabilitu, např. potenciálová energie, populační analýzy, elektrostatický potenciál a Fukio funkce.

Druhá část práce pak diskutuje autorovy výpočty vlastností DGA molekul, respektive čtyři varianty DGA molekul pro různé těžké radikály. První část této kapitoly je zaměřena na konformační analýzu DGA molekul, následováno odhadem stability molekul pomocí velice podrobného určení Fukio funkcí a Fukio nábojů. Poslední část pak určuje stabilitu molekul výpočtem výšky energetické bariéry nutné k rozpadu molekuly.

Práce je považuji za velice zajímavou, přispívající k technologii zpracování jaderného paliva. Práce je dobře napsána, čistou angličtinou bez chyb a překlepů. Práci navrhuji ohodnotit známkou výborně (A).

Dotazy k diskuzi:

- 1) Upřesněte prosím, jak byla zavedena kyselost prostředí (přítomnost  $H^+$ ,  $H_3O^+$ ,  $HNO_3$ ) do výpočtů.
- 2) Velice mě zaujal graf 2.7, kde radikálová Fukui funkce je vyjádřena pro studované molekuly v přítomnosti kyselého prostředí. Proč pro  $H^+$  a  $H_3O^+$  Fukio funkce roste, zatímco v přítomnosti  $HNO_3$  klesá? Znamená to, že přítomnost  $HNO_3$  kyseliny zvyšuje stabilitu DGA molekul?
- 3) V práci bylo použito několik přístupů k výpočtu stability molekul. Stručně porovnejte klady a zápory jednotlivých teoretických přístupů k vyjádření stability molekul (silná a slabá místa jednotlivých technik).
- 4) V konformační analýze je určen počet stavů v rozsahu 3kcal/mol nad základním stavem (Tab. 2.1).

(a) Jak je určen počet stavů, pokud část molekuly je rotačně invariantní? Respektive, je např. úhlová orientace (úhlové natočení) jednotlivých radikálů energeticky závislé (t.j. anizotropní)?

(b) Sloupec PC je pak procentní zastoupení jednotlivých nízkoenergetických konformací. Je je spočítán celkový počet konformací (procenta počítána z jakého celku)?

5) Drobné poznámky: v práci jsou použity jednotky energie kJ/mol i cal/mol, což ztěžuje porovnání hodnot pro čtenáře. Proč nejsou použity atomové jednotky energie, např. eV/molekulu.

V Praze 17.7.2020

Mgr. Jaroslav Hamrle, Ph.D.  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská ČVUT  
115 19 Praha 1