

Posudek diplomové práce „Intermolecular Interactions in Fullerene Solids“ Miroslava Rubeše.

Práce předkládá velké množství systematických výpočtů směřujících ke konstrukci mezimolekulového potenciálu pro C_{60} s ohledem na obecnou použitelnost vypracované metodiky i pro jiné systémy. V práci je srovnána a kriticky zhodnocena celá řada metod, což má význam nejen pro tuto konkrétní studii, ale i pro obecné studium a dokumentaci použitelnosti jednotlivých kvantově-chemických modelů. Práce přináší četné nové výsledky. K obsahu nemám žádných zásadnějších připomínek a navrhuji práci k přijetí a klasifikaci *výborně*. Dále uvedu jen několik drobných poznámek, na které může student reagovat.

Na základě čeho se domníváte, že párový potenciál je v případě mezimolekulových interakcí adekvátní?

Jak důležitý by mohl být coupling intra a inter molekulového potenciálu?

Nejzajímavější bude patrně použití získaného potenciálu pro další simulace. Jaké simulace hodláte provést?

Filip Uhlík, 15. 5. 2005