

Posudek dizertační práce

Petr Daněček: Anharmonic and solvation effects in vibrational spectroscopy

Námětem dizertace je teoretické studium role vibrační anharmonicity a solvatačních efektů v molekulovém spektru. Metodickým nástrojem studia je autorem vytvořený výpočtový aparát zahrnující základní metodické postupy z literatury s návazností na komerčně dostupné kvantově-chemické výpočtové programy. Praktickým cílem studia je kritické posouzení aplikačního potenciálu současné teorie molekuly pro extrakci strukturní informace z experimentálního vibračního spektra. Vlastní studium je realizované formou modelových výpočtů pro reprezentativní soubor molekulových útvarů. Výsledky dizertace jsou doloženy párem publikací v prestižních mezinárodních časopisech a programovým balíkem umístěným na WEBu.

Vybudovaný výpočtový aparát vykazuje vysokou uživatelskou robustnost a flexibilitu a jeví se tak jako vysoce užitečný nástroj pro teoretické analýzy experimentálních spekter. Jako zejména slibné vidím jeho použití v oboru vibračního cirkulárního dichroismu, tedy v oboru ve kterém "domácí" pracoviště autora patří do světové špičky. Jinými slovy, dizertaci oceňuji jako aktuální a přínosný počín. Nicméně, jako její potenciální uživatel se nemohu vyhnout několika více či méně obecným otázkám a komentářům:

- Domnívám se, že by mnoho čtenářů uvítalo otestování rozvoje potenciální energie do vyšších mocnin než do standardního kvartického rozvoje. Lze automaticky očekávat, že vyšší rozvoje zaručí fyzikální korektnost popisu vibračních pohybů zahrnujících atomy vodíku?

- Vzhledem k relativně nízké náročnosti poruchové metody se jeví jako žádoucí prosudování metod vyšších řádů. Bylo od tohoto studia upuštěno vzhledem ke známému divergenčnímu chování poruchových řad oscilátorů?

- Jaké je fyzikální opodstatnění použití normální souřadnice pro popis vibračních módů spojených s konformační nestabilitou (systémy s víceminimovými potenciály) či

pohybů oponovaných silně neharmonickými potenciály (např. pyramidalizace peptidické vazby)?

- Jaká je robustnost numerického výpočtu vyšších silových konstant? Dostačují literární postupy skutečné potřebě?

I když uvedené dotazy nepokládám za nezávažné, určitě neshledávám, že je autorovou povinností poskytnout vyčerpávající odpovědi v rámci této dizertace. Tu považuji za velmi dobrou a doporučuji ji v předloženém tvaru jako zcela dostačující podklad pro udělení vědecké hodnosti PhD.



24.10.2007 Praha

Vladimír Špirko

Biomolekuly a komplexní molekulární systémy

Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i,

Akademie věd České republiky

Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6