

Universita Karlova, Praha,  
Matematicko-fyzikální fakulta

Posudek školitele

Disertační práce: Mgr. Petr Daněček: Anharmonic and solvation effects in vibrational spectroscopy

Školitel: Doc. RNDr. Petr Bouř, CSc.

Konzultant: Doc. RNDr. Vladimír Baumruk, DrSc.

Ve své práci se Mgr. Petr Daněček zabývá anharmonickými efekty v simulacích vibračních spekter, zejména polárních a silně hydratovaných molekul. Přesné simulace, včetně anharmonických korekcí, jsou důležité např. pro strukturní studie biologicky zajímavých molekul. Zejména interpretace pokročilých experimentálních technik, jako je Ramanova optická aktivita, na kterou je práce zaměřena, se bez teoretického zázemí neobejde.

Hlavní přínos studie spočívá v systematickém zmapování různých způsobů výpočtů vibračních energií molekul a vhodnosti aplikace těchto metod na konkrétní systémy. Je například zajímavé sledovat rozdílnost výsledků, které lze obdržet ze stejného potenciálu rozdílnými anharmonickými přístupy. Uvedený detailní rozbor chování eVSF a gVSCF přístupů nebo modifikované poruchové teorie nebyl, pokud je mi známo, dosud v literatuře diskutován.

Stejně tak je originální aplikace anharmonických korekcí pro výpočet Ramanovy optické aktivity, i když při současných výpočetních možnostech použité korekce nevedly vždy ke zlepšení. Význam práce roste i ve světle posledních experimentálních výsledků dosažených na FÚ MFF, kdy se povedlo změřit spektra pro silně anharmonické vibrace (obr. 3.4. na straně 63) a stanovit vliv flexibility molekul na tvar spekter (např. reference 7, 59, 60 v práci).

Pro vibrační výpočty autor vyvinul kompaktní soubor programů (Gvib, ref. 52). Impakt této části práce mohl být ovšem ještě vyšší a čas strávený programováním efektivnější, kdyby vzal v úvahu některé požadavky a specifické programové vybavení školícího pracoviště.

Práce je psána velice kultivovanou angličtinou se zanedbatelným množstvím gramatických chyb. Systematickým rozбором jednotlivých výpočetních metod a koherentním značením tvoří text velice kompaktní celek, i když některé partie jsou možná zbytečně moc podrobné (variační princip, poruchový počet) a některé zase příliš stručné (např. chybí detaily VSCF implementace).

Také věcné chyby jsou spíše výjimkou (str. 23 – násobení v původní MP2 metodě je úměrné  $N^5$  a ne  $N^4$ , str. 25 – HF není část DFT, jak je uvedeno, str. 40 dole – diskuze neurčitosti času a energie ve spojení s poruchovým počtem a fluktuací laserové frekvence je pro mě nesrozumitelná) a obecně by

mohl text dobře sloužit i jako učebnice. Studie také vyústila do dvou velice kvalitních publikací a další dvě se připravují.

Proto se domnívám, že Mgr. Petr Daněček prokázal schopnost vědecké práce, a disertaci, která splňuje všechny zákonné i odborné požadavky, doporučuji k obhajobě.

Praha, 8. 10. 2007

Petr Bouř

Ústav organické chemie a biochemie,

Akademie věd České republiky,

Flemingovo nám. 2, 16610 Praha 6.