

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího  
 bakalářské práce
- posudek oponenta  
 diplomové práce

Autor: Jan Hermann  
Název práce: Assessment of Dispersion Corrected Density Functional Methods  
Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika  
Rok odevzdání: 2011

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: RNDr. Dana Nachtigallová, PhD.  
Pracoviště: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR  
Kontaktní e-mail: dana.nachtigallova@molecular.cz

## Odborná úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Věcné chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu přiměřený počet  méně podstatné četné  závažné

## Výsledky:

- originální  původní i převzaté  netriviální kompilace  citované z literatury  opsané

## Rozsah práce:

- veliký  standardní  dostatečný  nedostatečný

## Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

## Tiskové chyby:

- téměř žádné  vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet  četné

## Celková úroveň práce:

- vynikající  velmi dobrá  průměrná  podprůměrná  nevyhovující

**Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/oponenta:**

Předložená práce se zabývá detailním studiem chování metody LAP (lokálních atomových potenciálů), jedné z opravných metod DFT metod pro výpočet disperzní interakce slabě vázaných komplexů. Autor představuje novou modifikaci LAP metody a její použitelnost diskutuje především s ohledem na její transferabilitu. Selhání DFT metody při popisu disperze je jejím zásadním problémem i s ohledem na skutečnost, že DFT metoda je v současné době jednou z nejpoužívanějších metod používaných pro modelování chemických systémů. Studovaný problém je proto vysoce aktuální.

Práce je rozdělena na tři části. První část obsahuje stručný a přehledný popis DFT metody a interakcí definujících disperzi. Selhání DFT metody je ilustrováno na modelovém systému benzen-argon. V závěru této části jsou představeny metody používané pro opravu DFT metody při popisu disperzních interakcí. Tato část je zpracována na skvělé úrovni. Autor jednoznačně prokazuje plné pochopení daného problému.

V druhé části je definována metoda lokálních atomových potenciálů, včetně nové modifikace umožňující konstruovat potenciály, aniž by bylo nutné apriori předpokládat jejich formu. Jak autor uvádí, výhodou nově zavedené modifikace je možnost získání přesné shody s referenčními interakčními křivkami a lepší pochopení chování LAP metody. Rovněž tato část je výborně zpracována a autor prokazuje, že se s náročnou problematikou, výrazně přesahující úroveň bakalářského studia, do detailů seznámil.

V třetí části jsou prezentovány výsledky získané pomocí modifikované LAP metody pro modelové systémy komplexů benzenu s atomem vzácného plynu. Výsledky logicky seřazeny a věcně diskutovány. Diskuse výsledků se zaměřuje především na transferabilitu potenciálů a důvody jejího selhání jsou jasně formulovány. O tom svědčí i fakt, že není potřeba vznášet doplňující dotazy.

**Celkově považuji práci za mimořádně zdařilou. Ráda bych také ocenila mimořádně dobrou kvalitu anglického jazyka. Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji klasifikovat jako výbornou.**

**Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

nejsou

**Práci**

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

**Navrhuji hodnocení stupněm:**

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

V Praze 29. srpna 2011

RNDr. Dana Nachtigallová PhD.