

## Oponentský posudek bakalářské práce Evy Pluhařové

### „Počátek solvatace iontů studovaný ab initio výpočty: srovnání vody a methanolu“

Předložená bakalářská práce se zabývá převážně kvantověchemickým studiem mikrosolvatace konkrétně vodnými a methanolvými klastry obsahujícími jeden ion ( $\text{Na}^+$ ,  $\text{F}^-$  a  $\text{Cl}^-$ ) a 1 – 3 molekuly rozpouštědla. Jde nepochybně o stále aktuální téma fyzikálněchemického výzkumu, neboť solvatace je všudypřítomný jev mající výrazný dopad na široký okruh (bio)chemických procesů, zvláště těch, které zahrnují nabitě částice.

Práce sepsaná v angličtině budí mimořádně příznivý dojem jak svou kvalitou, šíří záběru, zpracováním i svou „zralostí“. Jsem přesvědčen, že by tato bakalářská práce mohla být úspěšně obhájena i jako práce diplomová. Tomu nasvědčuje i fakt, že její podstatné výsledky byly zpracovány pro publikaci v CCCC. Z drobných nedopatření (kromě překlepů) bych jen upozornil na chybějící závorky v rovn. (6) a nekonzistentní označení vzhledem k rovn. (6) a (10).

K práci uvádím jednu poznámku a dva dotazy:

V případě klastru  $\text{Na}(\text{H}_2\text{O})_n^+$  by bylo bývalo zajímavé studovat i klastry s  $n=4$ , protože z dřívějších studií je známo, že první solvatační vrstva těchto klastrů v plynné fázi obsahuje 4-5 molekul rozpouštědla.

Je něco známo o reakčním profilu chemické reakce  $\text{Na}^+ + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{NaOH} + \text{H}^+$  ?

Zkoušeli jste počítat i klastry se směsnými rozpouštědly, např.  $\text{H}_2\text{O} + \text{CH}_3\text{OH}$  ?

Souhrnem konstatuji, že bakalářská práce Evy Pluhařové přinesla řadu velmi zajímavých poznatků, má výbornou úroveň, a proto ji s potěšením doporučuji k obhajobě. Navrhuji klasifikaci známkou výborně.

Doc. RNDr. Jiří Fišer

KFMCh PĚF UK

Praha, 14.6. 2008