

## Oponentský posudek bakalářské práce Michala Koláře

Bakalářská práce Michala Koláře se zabývá geometrickou a energetickou charakterizací dimeru fenolu. Toto téma je velmi aktuální, protože nedávno publikované experimentálně naměřené rotační konstanty tohoto systému umožňují snadné porovnání experimentální struktury s teoreticky spočtenou. Autor se ve své práci zaměřil na úspěšnost predikce struktury celou škálou metod kvantové chemie od HF, DFT, MP2 až po CCSD(T) s použitím různých bází AO a ukazuje, že DFT metoda s empirickým disperzním členem poskytuje nejlepší shodu s experimentem.

Jedním pro mnohé možná překvapivým výsledkem této práce je fakt, že metoda MP2, která se v kvantové chemii běžně používá pro získání hodnověrných geometrií molekul neposkytuje při použití velké báze AO z důsledku přecenění disperzní energie geometrii, která by byla blízká experimentální.

Součástí práce je i příloha zahrnující jednu práci v tisku v prestižním zahraničním časopisu. Dále je třeba velmi pozitivně hodnotit, že práce je napsána v anglickém jazyce, slohově i gramaticky na vysoké úrovni, navíc i velmi pečlivě s minimálním množstvím překlepů. Z předložené práce je vidět, že autor zvládl celou řadu výpočetních metod moderní kvantové chemie za použití různých výpočetních programů (Molpro, Gaussian, Turbomole), což lze u bakalářské práce hodnotit jako výrazně nadstandardní záležitost.

K práci nemám vážnějších výhrad, snad jen pro přímé určení vlivu disperzní energie na získanou geometrii a stabilitu by bylo vhodné použít stejný funkcional pro případy, kdy disperze je a není zahrnuta. Celkově hodnotím práci jako velmi povedenou a milerád je doporučuji k obhajobě.

Otázka k obhajobě:

1. Na str. 17 autor uvádí, že „RI aproximace významně snižuje výpočetní nároky.“ Jak velká je časová úspora a jak výrazně se projeví použití této aproximace na kvalitě získaných geometrií a interakčních energií oproti datům získaných bez této aproximace?

V Praze 12.6. 2007

Mgr. Martin Kabeláč, PhD.