

## Oponentský posudek bakalářské práce Kristýny Pluháčkové

Bakalářská práce Kristýny Pluháčkové se zabývá teoretickým studiem nekovalentně vázaných molekul. Práce je rozčleněna do teoretického úvodu, metodologické části a výsledků, které jsou rozděleny do 2 podkapitol, věnovaných jednak patrovým komplexům a jednak vodíkově vázaným komplexům. Součástí práce jsou i dvě přílohy zahrnující jednu práci publikovanou v zahraničním periodiku a jednu práci v tisku. Autorka si pro psaní zvolila těžší možnost, práce je napsána v anglickém jazyce, po slohové a gramatické stránce na velmi dobré úrovni a s minimálním množstvím překlepů.

Cílem této práce byla:

1. přesná energetická charakterizace patrově vázaných komplexů různých derivátů benzenu a rozčlenění stabilizační energie do různých energetických příspěvků.
2. výpočet IČ spekter komplexu halothan –aceton.

Z předložené práce je vidět, že si autorka osvojila velké množství výpočetních technik kvantové chemie (určení stabilizační energie, vibrační analýza, SAPT, NBO) a je schopna pracovat samostatně s celou řadou kvantově chemických programů (Molpro, Gaussian, Turbomole), což lze považovat v případě bakalářské práce za výrazně nadstandardní záležitost. O mimořádných kvalitách bakalářské práce svědčí i dvě práce publikované v zahraničních časopisech, což je spíše na úrovni velmi dobré diplomové práce.

K práci mám tyto drobné výhrady:

V teoretické části v kapitole věnované DFT metodám jsou z různých tříd funkcionálů zmíněny pouze GGA funkcionály, ačkoliv sama autorka ve své práci používá funkcionály TPSS, který patří do třídy meta-GGA funkcionálů a PBE0 patřící do třídy hybridních funkcionálů.

Pro běžného čtenáře by bylo užitečné v rámci metody SAPT definovat jednotlivé energetické příspěvky k celkové stabilizační energii podobným způsobem, jak to bylo provedeno pro disperzní energii na str. 23.

Reference číslo 16 je neúplná.

Přes tyto malé výtky považuji předkládanou bakalářskou práci za mimořádně zdařilou a výrazně nadprůměrnou a vřele ji doporučuji k obhajobě.

Otázky k obhajobě:

1. U MP2 metody je doporučováno pro srovnání spočtených a experimentálních vibračních frekvencí škálovat vypočtené hodnoty faktorem přibližně 0,95 v závislosti na použité bázi AO. Proč v této práci frekvence nebyly škálovány? Byla zkoumána citlivost získaných hodnot vibračních frekvencí na použité bázi AO?
2. Na str. 17 je uvedeno, že zahrnutí empirického výrazu pro disperzní energii k celkové DFT energii je jednou z možností, jak se úspěšně vypořádat s problémem, že DFT teorie selhává pro popis systémů, pro které je důležitá disperzní energie. Jaké alternativní možnosti pro popis disperze v DFT ještě existují?

V Praze 12.6. 2007

Mgr. ~~Martin~~ Kaběláč, PhD.