

Posudek školitele na diplomovou práci Jana Hermanna

„Nonlocal correlation in density functional theory“

Diplomová práce Jana Hermanna „Nonlocal correlation in density functional theory“ se zabývá vlastnostmi a aplikací metod založených na nelokálním funkcionálu hustoty, jehož vývoj trval bezmála 20 let a jehož první obecná formulace byla poprvé opublikována až v roce 2004. V posledních 10-ti letech došlo k velmi intenzivnímu vývoji nových přístupů založených na Rutgers-Chalmers formulaci a směřujících k co nejpřesnějšímu popisu nekovalentních interakcí v komplexních molekulových systémech v rámci teorie funkcionálu hustoty (DFT).

Význam DFT pro výzkum v oblasti materiálové chemie je všeobecně znám. Pro celou řadu úloh je však použití standardních (GGA) funkcionálů velmi problematické a jejich nasazení vyžaduje korekci na nelokální korelační efekty. Předložená diplomová práce přistupuje k tomuto problému fyzikálně nejkorektnější, avšak z hlediska metodologie nejobtížnější cestou: zavedením nelokálního funkcionálu hustoty. Její obtížnost dokumentuje například samotná implementace vdW-DF metody představující zhruba 6000 řádků zdrojového kódu v programovém prostředí MATLAB, která byla jen jedním z dílčích cílů celého projektu.

Hlavním přínosem práce je návrh nové metody založené na využití vdW-DF funkcionálu pro parametrizaci DFT/CC. Nově vyvinutá metoda byla úspěšně testována pro popis interakce molekul s povrchem křemene a lamelárními zeolity a získané výsledky již byly zaslány do impaktovaného odborného časopisu (Journal of Chemical Physics).

Závěrem konstatuji, že Jan Hermann prokázal při vypracování své diplomové práce vynikající odborné předpoklady, mimořádné úsilí a kritické myšlení, které je nezbytnou součástí každé vědecké práce. Proto doporučuji tuto práci k obhajobě s hodnocením **v ý b o r n ě**.

Praha 22.5. 2013

RNDr. Ota Bludský, CSc.

Ústav organické chemie a biochemie AVČR, v.v.i.