

Abstrakt

Cílem této práce je určit sílu a původ stabilizace různých typů nekovalentních interakcí, a to z důvodu, že by jejich znalost mohla vést k racionalizaci a hlubšímu pochopení vazebních motivů. Dalším cílem je podílet se na vývoji nových nekovalentních datasetů, které jsou v současné době, v procesu parametrizace a testování nových výpočetních metod, nezastupitelné.

V rámci jednotlivých projektů byly zkoumány různé vazební motivy modelových komplexů, které představují obvykle krystalové struktury, struktury z neoptimalizovaných skenů nebo lokální minima. Referenční stabilizační energie byly počítány na *ab initio* úrovni (např. CCSD (T)/CBS nebo QCISD(T)/CBS). Následně byla testovaná přesnost výpočetně méně náročných metod (např. MP2.5, DFT-D nebo SQM metod) vůči referenční metodě. DFT-SAPT výpočty byly často využívány za účelem zjištění povahy stabilizace komplexů.

První část práce se zabývá významem a základními vlastnostmi různých typů nekovalentních interakcí (např. halogenové vazby, vodíkové vazby atd.). Druhá část popisuje výpočetní metody, které byly důležité v rámci našich studií. Poslední část této práce má za účel poskytnout přehled o části našeho výzkumu, která souvisí s tématem této disertační práce a na niž jsem se podílel během mého doktorského studia.