

Posudek disertační práce RNDr. Róberta Sedláka  
“Quantum-chemical study of the noncovalent interaction”

Předložená disertační práce Dr. Sedláka je významným příspěvkem ke studiu slabých nekovalentních interakcí. Věnuje se převážně doposud méně studovaným typům interakcí, jako je interakce s halogeny (halogenová vazba) či dvoj-vodíková vazba a podstatě těchto interakcí. Navíc práce přispívá k rozšíření setu dat přesných interakčních energií (L7 Data Set) a k poznatkům o možnostech mnoha kvantově-chemických metod při popisu slabých interakcí.

Práce je členěna do tří základních úseků. První, relativně rozsáhlá část, se věnuje významu a podstatě nekovalentních interakcí a kritickému zhodnocení metod vhodných (nebo nevhodných) ke studiu nekovalentních interakcí. Druhý úsek se věnuje popisu sedmi studovaných projektů, výsledkům a diskusi. Na závěr jsou stručně uvedeny základní závěry všech studovaných projektů. V poslední části jsou přiloženy kopie sedmi publikací Dr. Sedláka. Každá publikace odpovídá jednomu z projektů.

Úvodní část neobsahuje příliš mnoho matematických formulací (snad s výjimkou diskuse o atomových nábojích), ale všechna tvrzení jsou dokladována odkazem na originální práce, což z této části činí celkem úctyhodný přehled a zdroj poučení pro následovníky.

Výběr projektů jasně sleduje moderní trendy ve studiu nekovalentních interakcí. O vodíkové vazbě toho víme už mnoho, ale zajímavá a překvapivá interakce s halogeny je v současné době předmětem bádání v mnoha laboratořích (přestože např. struktura  $(I_2)_2$  s navzájem kolmými molekulami je k nalezení v učebnicích anorganické chemie už mnoho let). Podobné je to s vazbou  $-H...H-$ .

Sedm publikací ve významných světových časopisech je jistě úctyhodný výsledek doktorského studia, také díky kvalitě laboratoře, kde Dr. Sedlák pracoval.

Přes svůj velký rozsah (který ale příliš nešetří oponenty) je práce velice pečlivě sepsána v dobré angličtině s minimem překlepů. Namátkově, v českém abstraktu nejsou správně rozdělena některá slova (racionalizaci, modelových), na str. 15 není uzavřená závorka, v Obr. 3.4 jsou čarou spojeny hodnoty, které spolu nesouvisí – bar diagram by byl vhodnější, na str. 145 jsou uvedena procenta dispersního, elektrostatického a indukčního příspěvku, která v sumě dávají 204% (co tedy ta procenta znamenají?).

Celkově lze říci, že kandidát předložil velice kvalitní disertační práci, která jasně prokazuje jeho schopnosti vědecky pracovat, přináší velké množství nových poznatků a je dokumentována 7 kvalitními publikacemi.

Doporučuji proto přijmout tuto disertaci jako podklad pro další řízení k udělení vědecké hodnosti Ph. D.

Zdeněk Havlas



V Praze, 11. listopadu, 2014