



Posudok na dizertačnú prácu RNDr. Róberta Sedláka

RNDr. Róbert Sedlák, poslucháč doktorského študijného programu „Modelování chemických vlastností nano- a biostruktur“ na Přírodovědecké fakulte Univerzity Karlovy v Prahe, školiace pracovisko Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, predložil dizertačnú prácu:

„*Kvantově-chemická studie nekovalentních interakcí*“.

Práca, napísaná v angličtine, má imponujúci rozsah 169 strán a je rozčlenená do 4 kapitol (úvod, metódy, projekty, závery). Súčasťou dizertácie je príloha so siedmimi vedeckými článkami publikovanými v renomovaných (karentovaných a vysoko-impaktových) časopisoch, kde prešli prísny recenzný procesom. Na troch je doktorand uvedený ako prvý autor. Treba oceniť aj fakt, že ku dňu vypracovania tohto posudku mal autor spolu 15 karentovaných článkov s celkovým počtom citácií 156 a h-indexom 8. Z formálneho hľadiska teda práca spĺňa, dokonca prekračuje požiadavky príslušnej odbornej rady.

Veľký rozsah práce evokuje drobnú poznámku. Doktorand sa zbytočne podrobne rozpisal v kapitole 2 o metódach na výpočty nekovalentných interakcií, text pôsobí miestami rozvláčne. Stručne povedané: *Menej býva viac*. To isté platí aj o prezentácii jednotlivých projektov. Ďalším nedostatkom práce je angličtina samotná – autor si miestami zamieňa singulár/plurál, používa „slovanský“ slovosled a nesprávne anglické termíny (later/latter, quite/quit, employees/employs), čo v niektorých pasážach robí text pomerne záhadný. Rovnice uvedené pre CBS limitu, (2.1) a (2.2) nie sú formálne v poriadku.

Napriek týmto kritickým poznámkam je neodškriepiteľné, že autor preukázal výnimočne dobrú teoretickú erudíciu a výpočtové zručnosti na modelovanie nekovalentných interakcií v širokom spektre metód a počítaných systémov, resp. v dômyselnom výbere súborov „benchmarkových“ dát. Potvrďuje to aj široká akceptácia týchto súborov v medzinárodnej vedeckej komunite.

Otázky/námety do diskusie:

1. Na str. 37 je tvrdenie, že: „DFT itself is exact (provides the exact solution of the Schrödinger equation), including long-range correlation dispersion“. Nepovažujem to za celkom správne. Ako DFT tak aj HF metóda zavádzajú do riešenia aproximácie, rozdiel je v tom, že to robia v rôznych štádiách riešenia Schrödingerovej rovnice. Aký je z tohto pohľadu rozdiel medzi DFT a HF?

2. Rutinná korekcia na BSSE pre rigidné systémy A, B a AB je dobre definovaná. Ako by však autor postupoval v prípade, že počas interakcie dochádza ku geometrickej relaxácii podsystemov?
3. V CT komplexoch je významný prenos náboja, napr. z orbitálov σ na σ^* . V niektorých anorganických CT komplexoch (napr. ligand-metal, L-M) možno pozorovať aj tzv. spätnú donáciu z M na L. Bolo možné sledovať niečo podobné, t.j., spätnú donáciu aj vo vašich výpočtoch súborov „benchmarkových“ dát?

Záverom konštatujem, že doktorand predložil v dizertácii veľmi dobré originálne a publikované výsledky. Spomínané formálne chyby nijako neznižujú jej excelentný obsah. Práca spĺňa požiadavky kladené na dizertačnú prácu na Univerzite Karlovej, doktorand v nej preukázal schopnosť a pripravenosť k samostatnej vedeckej činnosti. Odporúčam ju preto ako podklad k obhajobe a po úspešnej obhajobe udeliť doktorandovi akademický titul Ph.D.

V Bratislave 17. 11. 2014

Prof. RNDr. Ivan Černušák, DrSc.