

**Oponentský posudek doktorské disertační práce Mgr. Miroslava Rubeše**  
**„A novel approach for description of non-covalent intermolecular interactions “**

V posledních zhruba patnácti letech došlo k výraznému pokroku jak v experimentálním, tak i teoretickém výzkumu nekovalentních interakcí v různých molekulových systémech a fyzikálně chemických procesech, počínaje např. interakcemi biomolekul, přes adsorpční, solvatační a agregační procesy a konče třeba katalýzou. Z mnoha *ab initio* metod výpočetní chemie se ukázaly pro tyto účely jako nejnadějnější metody funkcionálu elektronové hustoty (DFT) ovšem se zahrnutím zejména disperzních interakcí. V předložené disertační práci se autor zabývá právě jedním z těchto přístupů – metodou funkcionálu hustoty korigovanou na přesnost metody spřažených klastrů (DFT/CC).

Disertační práce obsahuje vedle úvodní kapitoly podrobnou metodickou část (kap. 2), v níž je uveden základní fyzikální aparát, na němž jsou jednotlivé typy výpočtů založeny (včetně testování interakcí), a souhrn a zhodnocení výsledků (kap. 3). Přílohy zahrnují rozsáhlý soubor reprintů 12 článků v impaktovaných vesměš špičkových časopisech, přičemž v polovině z nich je disertant uveden jako první autor, ve třech pracech je druhým autorem. Tato skutečnost jasně dokumentuje disertantův podíl na zmíněných publikacích. První tři práce uvedené v dodatcích A, B, C se týkají ověření a aplikací metody DFT/CC. Dalších 6 článků se zabývá mezimolekulovými interakcemi v pevných látkách či v příslušných modelových systémech nebo nanočásticích. Poslední trojice článků se věnuje problematice adsorpce malých molekul v zeolitech a příbuzných strukturách.

Navrhuji, aby se autor v diskusi vyjádřil k následujícím otázkám: 1. V disertační práci je sice zmíněna možnost zahrnutí tříčásticových efektů v nekovalentních interakcích, avšak myslím, že této otázce měla být zejména v úvodní části věnována mnohem větší pozornost. Bylo by vhodné, aby autor stručně shrnul výsledky v této oblasti a naznačil možnosti metody DFT/CC v tomto směru.

2. Jeden z článků (dodatek E) se věnuje kompatibilitě DFT výpočtů s bázi rovinných vln a molekulových výpočtů s gaussovskými bázemi. Podle autorů na CBS úrovni oba přístupy konvergují k týmž výsledkům. Je tento závěr potvrzen i výpočty na jiných systémech?

3. Před několika týdny (a po odevzdání disertační práce) vyšla zajímavá práce Liu a Goddarda (Y. Liu, W.A. Goddard, III, J. Phys. Chem. Lett. 2010, 1, 2550), jež se vztahuje k obdobné problematice jako posuzovaná disertační práce. Navrhuji, aby autor porovnal Goddardův formalismus DFT-Ig s metodou DFT/CC.

4. Jak se liší v případě interakce molekulového vodíku s grafenem interakční energie struktury, kdy molekula  $H_2$  je kolmá k povrchu, oproti „rovnoběžné“ struktuře?

5. Jaké jsou možnosti použití metody DFT/CC ke studiu disociativní adsorpce např. dvouatomových molekul na površích?

Soudím, že jde o velmi kvalitní práce, jež se setkávají i s širokým mezinárodním ohlasem. Vzhledem k tomu, že všechny publikace prošly pečlivým recenzním řízením, mám pouze připomínku týkající se spíše formální stránky práce. Velmi příznivý dojem z celého díla si autor zbytečně poněkud pokazil českým autoreferátem s mnoha drobnými chybami a nevhodnými českými ekvivalenty.

Nicméně po prostudování díla mohu konstatovat, že posuzovaná doktorská disertační práce Mgr. Miroslava Rubeše má velmi dobrou úroveň. Podíl disertanta na společných publikacích považuji za významný a plně dostačující. Získané výsledky představují nesporný přínos ke studované problematice. Autor tak jednoznačně prokázal schopnost samostatné vědecké práce v teoretické chemii. Disertační práci proto rád doporučuji k obhajobě.

Doc. RNDr. Jiří Fišer

KFMCh PŘF UK

Praha, 22. 9. 2010