

Posudek oponenta na disertační práci Mgr. Jana Jirsáka

*On a molecular theory of water*

Je velmi zajímavé sledovat pokrok v oblasti, které jsem se kdysi sám aktivně účastnil. Myšlenka je zdánlivě velmi jednoduchá – vytvořit poruchovou statisticko-termodynamickou teorii vody. I když výsledek stále není ideální, bylo dosaženo značného pokroku. Jako referenční slouží nová generace „primitivních“ modelů popsanych přesněji Wertheimovou poruchovou teorií druhého řádu. K tomu se přidávají poruchové členy pro disperzní a dipolární síly. Doktorand se do tohoto velkého projektu zapojil tím, že navrhl stavovou rovnici referenční „primitivní vody“, zkoumal vliv jednotlivých členů na anomální vlastnosti vody a aplikoval teorii na „TIP4P vodu“.

Práce je stručným a přehledným výtahem ze čtyř recenzovaných článků, kde je doktorand prvním autorem. K názoru recenzentů těchto časopisů se rád připojuji, práci hodnotím jako výbornou a doporučuji ji k obhajobě.

K diskusi mám následující dotazy:

*K článku J. Mol. Liq. 136 (2007), 310:*

Potenciál TIP4P je jistě velmi jednoduchý a snadno se s ním pracuje. Ale pro tak malý systém jako dvě molekuly vody již moderní kvantové metody spočítají potenciální energii tak rychle, že by se mohly použít k nastavení primitivního modelu a k dalším výpočtům místo TIP4P. Další fitování by se pak mohlo provádět na vlastnosti reálné vody. Kolikrát je nutno počítat potenciál vody v průběhu postupu? Mohlo by vadit (termodynamická nekonzistence), že kvantový potenciál je v principu párově neaditivní?

*K článku J. Chem. Phys. 127 (2007), 124508:*

Rád bych se dověděl víc o rozdílu mezi TPT1 a TPT2, tj. o kolik je TPT2 lepší, v jakých oblastech, jak to závisí na dosahu potenciálu (site-site square well) atd.

A dvě drobné výtky:

V českém Souhrnu jsem nerozuměl zkratce RKP a musel jsem se podívat do anglické verze. V souhrnu by se neměly používat žádné zkratky kromě nejběžnějších.

Na str 22 je odkaz na „kvadratický disperzní člen“ v práci [33], Eq. (11). Na této rovnici však není nic kvadratického.

*Práci jsem prostudoval a doporučuji ji k obhajobě.*