

## **Příloha 7: Posudek oponenta habilitační práce**

### **Masarykova univerzita**

**Fakulta** Přírodovědecká fakulta  
**Habilitační obor** Fyzikální chemie

**Uchazeč** Dr. rer. nat. Markéta Munzarová  
**Pracoviště** Přírodovědecká fakulta, Masarykova Univerzita  
**Habilitační práce** Relationship between Structure and Magnetic Properties in Biomolecular, Inorganic, and Bioinorganic Systems

**Oponent** doc. RNDr. Petr Nachtigall, PhD.  
**Pracoviště** Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze

### **Text posudku**

Habilitační práce je založena na celkem dvanácti článcích v prestižních zahraničních časopisech (až na jeden všechny vyšlé) a třech kapitolách v odborných knihách (vše uvedeno jako příloha). Vlastní habilitační práce relativně stručně (na cca 30 stránkách textu) popisuje problematiku předkladatelky spolu se základním popisem metod a je zakončena částí „Conclusions and further development in the field“, která stručně a přehledně shrnuje nejdůležitější výsledky autorky a zároveň ukazuje, jak její výsledky byly přijaty odbornou veřejností a jak na ně bylo navázáno v dalších laboratořích. Vlastní práci hodnotím jako dobře napsanou, s velkým množstvím odkazů na relevantní literaturu a rovněž mnoha odkazy na vlastní práce autorky předložené v příloze. Práce je napsána dobrou angličtinou, přehledně organizovaná a je doplněna ilustrativními obrázky.

Sjednocujícím tématem předložené habilitační práce je teoretický popis a kvantitativní i kvalitativní pochopení magnetických vlastností relevantních pro experimentální NMR a EPR techniky. Autorka využívá řady kvantově chemických metod od semi-empirické EHT metod, přes metody založené na funkcionalu hustoty, až po *ab initio* metody zahrnující korelační energii. Metodika je využívána při studiu řady systémů, které se dají rozdělit do tří kategorií – biologicky relevantní systémy, bioanorganické systémy a anorganické krystaly. Výsledky získané pro jednotlivé systémy jsou v habilitační práci stručně a jasně popsány a čtenář je odkázán na relevantní publikace shrnuté v příloze. K formální ani věcné stránce nemám žádné připomínky.

Příloha sestávající ze 3 kapitol a 12 článků jasně dokumentuje postavení předkladatelky v oboru teoretických výpočtů NMR a EPR charakteristik v mezinárodním měřítku. Je třeba vyzdvihnout, že všech 13 příložených publikací je v těch nejlepších světových časopisech oboru: 5 v J. Am. Chem. Soc., 4 v J. Phys. Chem. B, 1 v Phys. Rev. B a 2 v J. Chem. Theory and Comput. Všechny tyto publikace musely projít náročných recenzním řízením a jejich kvalita je nezpochybnitelná. O kvalitě publikací a o postavení autorky habilitační práce v mezinárodním měřítku svědčí i její spolupráce s naprostými zahraničními špičkami v oboru (např. Prof. F. Neese, Prof. M. Kaupp, Prof. V. G. Malkin, Prof. F. Illas a Prof. R. Hoffmann). Přínos Dr. Munzarové k jednotlivým publikacím je evidentní a je v habilitační práci více než podrobně specifikován.

Studovanou tematiku a vybranou metodiku považuji za velice zdařilou a s potěšením mohu

konstatovat, že Dr. rer. nat. Markéta Munzarová svou systematickou prací přispěla k prohloubení našich znalostí o magnetických vlastnostech vybraných tříd molekul. Je třeba vyzvednout snahu předkladatelky své výpočty vždy dělat v těsném napojení na experiment. Spolupráce s předními experimentálními laboratoři je zcela evidentní. Ačkoliv je celkový publikační výstup předkladatelky spíše průměrný, nižší počet článků je více než kompenzován jejich odbornou kvalitou, která je evidentní. Všechny práce vyšly v těch nejlepších časopisech v oboru a o jejich relevantnosti svědčí i jejich vysoká průměrná citovanost (podle WOS skoro 33 citací na publikaci). Závěrem mohu konstatovat, že předložená habilitační je bezpochyby kvalitní a mohu ji doporučit k obhajobě.

### **Dotazy oponenta k obhajobě habilitační práce**

1. V souvislosti s nedávným vývojem nelokálních funkcionalů hustoty se nabízí otázka, jak užitečné mohou být pro popis struktury (a korespondujících magnetických vlastností) tyto nové funkcionaly, zejména u větších biologicky relevantních systémů. Existuje v současnosti nějaké srovnání lokálních, semi-lokálních či hybridních funkcionalů hustoty (diskutovaných v habilitační práci) s novými nelokálními funkcionaly pro popis magnetických vlastností?

### **Závěr**

Habilitační práce Markéty Munzarové „Relationship between Structure and Magnetic Properties in Biomolecular, Inorganic, and Bioinorganic Systems“ *splňuje* požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Fyzikální chemie.

Praha, dne...20. 1. 2014

  
Petr Nachtigall