

Posudek bakalářské práce Petry Bačové
Studium perzistenční délky lineárních polyelektrolytů v roztocích
Study of persistent length of linear polyelectrolytes in solutions

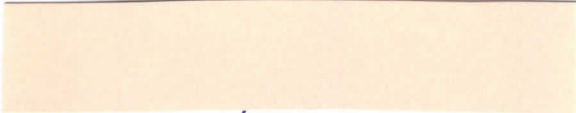
Téma práce – problematika perzistenční délky polyelektrolytů v roztocích – je aktuální, důležité a komplikované. S hodnotou perzistenční délky polyelektrolytu souvisí jeho konformační chování, od kterého se odvíjí možnosti využití polyelektrolytů (včetně biopolyelektrolytů) ve vodných roztocích.

Práce začíná pečlivě vypracovaným teoretickým úvodem. Jsou zavedeny a vysvětleny základní používané pojmy a modely polymerních řetězců. Druhá kapitola je věnovaná teorii perzistenční délky pro neutrální polymery a pro polyelektrolyty. Jsou uvedeny nejčastěji používané definice perzistenční délky pro neutrální polymery a jejich dvě možná rozšíření na polyelektrolyty. Vzhledem k omezenému rozsahu bakalářské práce uvedla Petra Bačová ze své důkladné široce zaměřené rešerše pouze nejdůležitější články úzce související s její vlastní prací.

Vlastní simulace prováděla Petra Bačová pomocí softwarového balíku ESPResSo, který naše skupina získala na základě mezinárodní spolupráce. Petra Bačová se rychle zorientovala a brzy začala samostatně pouštět simulace v Metacentru. Zvládla nejenom ESPResSo ale i operační systém linux, dávkové spouštění úloh v METACentru, gnuplot, TEX a další programy. Napočítala rozsáhlou sérii dat, z nichž je v bakalářské práci jenom část, a její studie bude dále pokračovat v rámci diplomové práce. Výsledky jejích simulací jsou publikovatelné a jsou významným příspěvkem k řešení grantového projektu GAUK 43-257269 „Studie perzistenční délky lineárních polyelektrolytů pomocí metod molekulové dynamiky“, jehož řešitelem je školitel konzultant Peter Košovan. Poster s jejími výsledky byl už prezentován na konferenci Polyelectrolytes 2008, Coimbra, 16-19. June 2008.

Petra Bačová pracovala pečlivě a samostatně. Iniciativně se sama od úplného začátku zapojovala do analýzy dat a přemýšlení o dalším pokračování simulací. Výsledkem je mimořádně kvalitní práce, kterou navrhuji hodnotit známkou výborně.

V Praze 10. 6. 2008


Doc. Ing. Zuzana ~~L~~impouchová, CSc.
školitelka