

## Posudek školitele na diplomovou práci pana Marka Vetešky:

### Molekulární simulace ve strukturní analýze interkalátů

Předkládaná diplomová práce je zaměřena na strukturní analýzu interkalovaných struktur hydrotalcitů metodami molekulárních simulací v kombinaci s práškovou difrakcí. Hydrotalcity jsou velmi často používanou vrstevnatou strukturou pro vývoj nových materiálů s širokým uplatněním v průmyslových aplikacích. Znalost struktury je tedy základem pro pochopení vlastností a vztahů ve struktuře daného materiálu. Diplomová práce v teoretické části shrnuje použité metody a postupy molekulárních simulací a RTG difrakce a stručně seznamuje s typickými vlastnostmi vrstevnatých struktur hydrotalcitů.

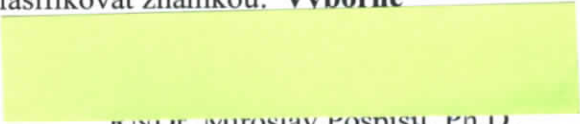
Praktická část je zaměřena na interkalaci hydrotalcitu anionty pyrentetrasulfonové kyseliny a lze ji rozdělit na tři tematické oddíly: (1) úprava softwaru SUPRAMOL tak, aby bylo možno tento program použít na hydrotalcitové vrstvy bez nutnosti pevné vazby mezi vrstvou a interkalovanou molekulou. Po úpravě je program použit na vygenerování množiny iniciálních modelů hydrotalcitu s pyrentetrasulfonovou kyselinou a tyto inicializační modely jsou dále minimalizovány metodami molekulárních simulací. (2) otestování a zjištění vlivu různých metod a postupů molekulárních simulací na minimalizaci iniciálních modelů, optimalizace minimalizační strategie a ověřování těchto postupů s experimentálními údaji. (3) na základě úpravy SUPRAMOLU a vypracovaných obecných minimalizačních postupů byly vyřešeny tři struktury hydrotalcitu interkalované pyrentetrasulfonovou kyselinou s různými mezivrstevnými vzdálenostmi. Jedná se o vzorek 1: 9,83 Å, vzorek 2: 13,63 Å a vzorek 3: 11,74 Å a 12,81 Å. Výsledky byly porovnány s RTG měřením odpovídajících třech reálných vzorků měřených při různé relativní vlhkosti.

Výsledková část je obsahově velmi široká a zahrnuje velmi cenné nové postupy a poznatky pro strukturní analýzu hydrotalcitů. Struktury, které byly vyřešeny, budou publikovány a rovněž doporučené postupy diplomové práce byly následně využity pro úspěšné vyřešení struktury hydrotalcitu interkalovaném benzoovou kyselinou. Autor práce zvládl teoretické základy a prokázal aktivní schopnost využití svých teoretických znalostí pro nové přístupy a řešení v molekulárních simulacích a následně jejich ověření na reálných vzorcích.

Předložená diplomová práce po formální stránce, svým rozsahem i obsahem splňuje podmínky kladené na diplomové práce a dávám doporučení k její obhajobě.

Diplomovou práci navrhuji klasifikovat známkou: **Výborně**

Praha 10. 5. 2006

  
RNDr. Miroslav Pospíšil, Ph.D.  
Katedra chemické fyziky a optiky  
MFF UK  
Ke Karlovu 3  
12116 Praha 2