

Oponentský posudek k diplomové práci p. Viliama Kolivošky s názvem „2D simulations of electromigration processes“.

V Praze dne 13. května 2008

Práce je zaměřena na tradiční problematiku, již se zabývá skupina prof. Bohuslava Gaše, a sice na počítačové simulace elektromigračních dějů. Narozdíl od v současnosti již zavedených 1D simulací, zastoupenými programy Simul a Peakmaster, se tato práce věnuje simulacím ve vícerozměrném uspořádání. Další odlišností je skutečnost, že simulace prováděné v rámci této práce nesledují nutně jádro elektroforetického procesu, tj. zkoumání elektromigrační disperze, systémových piků či nově oscilujících systémů, nýbrž se zaměřují na doprovodné jevy hrající roli v různých fázích elektroforetického pokusu, tj. odvod Jouleova tepla, elektrolýza BGE, dávkovací režimy.

Diplomová práce je pojata široce, jelikož pozornost je věnována jak kapilárnímu formátu, pro nějž jsou modelovány teplotní jevy a změna složení BGE vinou elektrolýzy, tak i plošnému uspořádání, pro který je modelováno dávkování v chipu s křížovou architekturou a jsou naznačeny možnosti simulace v kontinuální elektroforéze (FFE).

Práce je účelně členěna, výsledky jsou přehledně a názorně graficky vyvedeny. Podíl teoretické, metodické a výsledkové části je dobře vyvážen. Z formálního hlediska by k mírnému vylepšení již tak vysoké úrovně práce přispělo dle mého názoru rozdělení textu do podkapitol v úvodním přehledu (kap. 2), obecně o něco více informací v popisících obrázků (např. složení BGE, některé geometrické parametry apod. v obr. 10 – 15 na str. 45 – 49, navrhuji psát citace na literaturu ve formátu „1-4“ namísto „1,2,3,4“. Symbol *e.u.* (electrophoretical unit) udávající rozměr pohyblivosti ($10^{-9} \text{ m}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) by si zasloužil uvedení v seznamu symbolů. Literární přehled 2D a 3D simulací by mohl být rozšířen o další práce, například skupiny C.F. Ivoryho.

Z věcných dotazů uvádím tyto:

1. Jaká je výpočetní náročnost prováděných 2D simulací?
2. Na str.39 je diskutována „slip/no slip“ okrajová podmínka. Ač je tento typ podmínky v posuzované práci užíván k jiným účelům, bylo by jej možno využít i pro simulace jevu podobného názvu, kterým je skluz kapaliny po povrchu? Jde o jev vyskytující se v mikrofluidice, kdy tlakem hnaná kapalina má i na rozhraní se stěnou kanálku nenulovou rychlost právě v důsledku skluzu.
3. Jaký je původ geometrických parametrů elektrolytové nádoby, elektrody apod. v simulacích elektrolýzy v přístroji Agilent CE. Odpovídá průměr nádoby 6 mm polypropylenovým vialkám (objem ca 0.6 ml)? Jak by se změnilы výsledky simulací, uvažovali-li bychom jiné typy vialek použitelné v tomto přístroji, jako skleněná vialka o objemu ca 1.5 ml a konická vialka na vzorek?
4. Prosím o objasnění nízké koncentrace Na^+ u hladiny nádoby v obr. 20, str. 53. Má tento jev skutečný základ?
5. Proč byl v simulacích dávkování v CE chipu (kapitola 4.4.2) použit režim konstantního proudu? Pro CE v síťovacím prostředí bych čekal separaci při konstantním napětí. Konst. proud je naproti tomu typický pro ITP, navíc je na str. 37 -

38 uvedeno, že tento režim je obtížněji simulovatelný vinou komplikovanějších okrajových podmínek.

6. Jak si vysvětlit nevýznamný příspěvek vymežovacího proudu (constraint current) při stlačeném dávkování (pinched injection) na rozlišení píků A_3 a A_4 (str. 64 – 67)?
7. Čím si vysvětlit rozdílnou výšku píků na obr. 30, str. 62?
8. Nejsou mi jasné pohyby pro volbu malých rozměrů komory pro FFE $300 \mu\text{m} \times 590 \mu\text{m}$. Rozměry komor klasických FFE přístrojů jsou např. $12 \text{ cm} \times 50 \text{ cm} \times 1 \text{ mm}$ nebo pro chipovou FFE $3,5 \text{ mm} \times 10 \text{ mm} \times 10 \mu\text{m}$ (viz Kohlheyer, D. et al. *Anal.Chem.* **2007**, *79*, 8190-8198).
9. Pro účinnost FFE separací má klíčový význam odvod Jouleova tepla stěnami komory, v potaz je též nutno brát EOF, jelikož FFE komora je polouzavřený systém, a též deformaci dělených zón hydrodynamickým nosným tokem. Nakolik by započtení těchto jevů ztížilo simulaci? Byla by FFE komora kandidát na 3D simulaci?
10. Lze považovat tok chladicí kapaliny v simulacích rozdělení Jouleova tepla (kap. 4.4.4) za laminární? Jaké jsou možnosti pro simulaci turbulentního toku?

Z tématického hlediska je posuzovaná práce velice zajímavá, přičemž velký potenciál vidím v oblasti konstrukce elektroforetických zařízení, v níž mohou být 2D simulace nadmíru užitečné. Z precizního zpracování jak metodické tak výsledkové části je patrné, že autor je velmi dobře obeznámen s teorií elektromigračních procesů i s mnoha jejich praktickými aspekty. Posuzovaná práce dle mého mínění výrazně převyšuje požadavky kladené na diplomové práce a jednoznačně ji doporučuji ke schválení.

V úctě



Dušan Koval