

Školitelský posudek na diplomovou práci Viliama Kolivošky „2-D simulations of electromigration processes“

Odvození a formulace dynamických rovnic, které jsou s velkou přesností schopny popsat elektromigraci iontů nebo nabitých částic v roztocích, není tak obtížná. Protože se však jedná o parciální diferenciální rovnice, je jejich řešení obtížné a je možno je provést „analyticky“ (v uzavřeném tvaru) pouze pro jednoduché a triviální případy. Nabízí se numerické řešení, ale ani to není snadná úloha, protože rovnice jsou v principu nelineární. Numerické řešení dynamických rovnic je často nazýváno simulace a touto cestou se naše laboratoř vydala už před časem, kdy jsme vytvořili a publikovali simulační nástroj nazvaný Simul. Ten umožňuje simulaci elektromigrace v jednom prostorovém rozměru a je s velkou úspěšností nasazován například pro simulaci elektromigrace v módu kapilární elektroforézy. Pro složitější prostorové konfigurace, kdy geometrie separačního prostoru je komplikovanější, jako je třeba v mikročipové elektroforéze, je zapotřebí nasadit dvou- nebo tří-dimenzionální model elektromigrace – ve zkratce 2D nebo 3D model.

Touto cestou se vydal Viliam Kolivoška ve své diplomové práci. Navázal na diplomovou práci Jana Heydy a naprogramoval do prostředí softwaru Comsol Multiphysics rovnice, které korektně popisují elektromigraci. Velkou pozornost věnoval správnému popisu okrajových podmínek pro řadu rozhraní typických v elektroforéze, např. rozhraní mezi kapalným elektrolytem a pevným dielektrikem, kde dochází ke vzniku elektroosmotického toku, rozhraní mezi kapalným elektrolytem a kovovou elektrodou, kde dochází k elektrolýze elektrolytu, apod. Výsledkem jsou fascinující simulace chování takových konfigurací, které není možno získat jiným způsobem a které umožňují hluboké porozumění všem jevům, které v nich nastávají. Výsledky jsou originální a budou publikovány v odborném časopise.

Vil má výjimečné matematické schopnosti, které ve spojení s jeho chemickým základem jsou skvělým příslibem pro jeho vědeckou kariéru. Disponuje velmi dobrou mluvenou angličtinou. Pracoval velmi samostatně a intenzivně, jeho diplomová práce je velmi dobře napsaná a doporučuji její přijetí.

V Praze, 12. května 2008



Bohuslav Gaš
školitel