

Posudek bakalářské práce Lucie Suché
Konformační chování polymerních dendrimerů ve vodných roztocích
(Disipativní částicová dynamika)
Conformational Behavior of Dendritic Branched Polymers in Aqueous Solutions
(Dissipative Particle Dynamics)

Studovaná problematika je aktuální a zajímavá. Polymerní, resp. kopolymerní, dendrimery tvoří nanostruktury, do kterých se mohou solubilizovat hydrofobní látky a jejichž vlastnosti a citlivost na vnější podněty lze „ladit“ zaváděním různých funkčních skupin. Právě díky této variabilitě je polymerním dendrimerům v současnosti věnována velká pozornost jak z teoretického tak především z aplikačního hlediska.

Bakalářská práce je vypracovaná pečlivě. V jejím úvodu jsou zavedeny a vysvětleny základní používané pojmy a symboly. Simulační metoda je dobře vyložena včetně vysvětlení, jak jsou v DPD simulacích nastaveny základní parametry.

Vlastní simulace prováděla Lucie Suchá pomocí softwarového balíku DL_Meso, který je volně přístupný a je pro DPD simulace často využíván. Lucie Suchá nejprve na základě známého škálování homopolymerních dendrimeru ověřila, že má softwarový balík dobře nainstalován a že jej správně používá. Navazující parametrická studie konformačního chování kopolymerních dendrimerů je zaměřená na hledání parametrů vhodných pro studium solubilizace nízkomolekulárních látek do dendrimerů. V bakalářské práci je uvedena jenom část získaných výsledků, studie bude dále pokračovat v rámci diplomové práce.

Lucie Suchá pracovala samostatně a svědomitě. Během práce se hodně naučila. Zdokonalila se v programování (linux, C++, dávkové spouštění úloh v Metacentru), zpracovávání výsledků i jejich grafickém znázorňování (gnuplot, TEX). Výsledkem je kvalitní práce, kterou navrhuji hodnotit známkou výborně.

V Praze 3. 9. 2013

Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.
školitelka