

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno autora: Lucie Suchá
Studijní obor: Chemie v přírodních vědách
Název práce: Konformační chování polymerních dendrimerů ve vodných roztocích (Disipativní částicová dynamika)
Oponent: RNDr. Zbyšek Posel, Ph.D.

Předkládaná bakalářská práce využívá počítačové simulace ke studiu konformačního chování polymerních dendrimerů ve vodných roztocích. Práce má celkem 7 kapitol a její rozsah je přiměřený (celkem 31 stran). Seznam literatury obsahuje dostatečný počet odkazů (celkem 18), jak na základní literaturu studované problematiky, tak na nové odborné publikace. K samotné úpravě práce musím konstatovat, že bylo zvoleno vhodné formátování i členění textu. Po grafické stránce je práce také velmi kvalitně zpracována. Připomínky mám pouze ke členění kapitol. Přehlednější členění by bylo na Úvod, Metodologii, Výsledky a Závěr. Např. kapitola 4 *Redukované jednotky* nebo kapitola 5 *Gyrační poloměr* patří zcela jistě do Metodologie. Dále by bylo vhodné lépe oddělit teoretickou část a vlastní výsledky. Např. podkapitola 6.1 *Autokorelační funkce* a stejně tak rovnice (20) – (24) patří již do teoretické části.

Autorka provedla počítačové simulace polymerních dendrimerů ve vodných roztocích pomocí simulačního balíku DL_MESO a porovnávala škálovací koeficienty gyračního poloměru dendrimeru s již publikovanými daty. Velmi kladně hodnotím vytvoření vlastních programů pro generování vstupních souborů a pro zpracování výsledků. Právě schopnost používat simulační balíky spojená se schopností modifikovat vstupy a výstupy vlastními programy odpovídá modernímu pojetí počítačových simulací. I přesto mám k práci několik připomínek. Autorka se příliš nevěnuje popisu vlastních programů ani samotné realizaci provedených simulací (např. délka fáze ekvilibrace, generování dendrimeru, celková délka simulace, použité výpočetní prostředky, atd.). Dále postrádám širší diskuzi dosažených výsledků pro kopolymerní dendrimer, např. z hlediska radiální distribuční funkce. Proto mám k autorce práce následující otázky:

1. Byla provedena ekvilibrace systému před začátkem měření? Pokud ano, jak ekvilibrace probíhala?
2. Jak byly získány hodnoty škálovacích koeficientů na str. 23?
3. Vzorce (21), (22) a (23) nezávisí oproti vzorci (20) na počtu pater dendrimeru g . Můžete to vysvětlit?

I přes výše uvedené připomínky se mi práce studentky Lucie Suché líbí. Je vidět, že na dané problematice pracovala, získala řadu nových poznatků a osvojila si řadu nových dovedností na poli počítačových simulací. Mohu konstatovat, že práce splňuje všechny náležitosti bakalářské práce. Tímto ji doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení známkou **velmi dobře**.

V Ústí nad Labem, 10. září 2013

.....

RNDr. Zbyšek Posel, Ph.D.