

Posudek oponenta diplomové práce

Název práce: Interakce větvených kopolymerů s nízkomolekulárními sloučeninami – studie pomocí disipativní částicové dynamiky

Autor: Bc. Lucie Suchá

Vedoucí: doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.

Autorka se v diplomové práci zabývala mesoskopickým modelováním interakcí blokových amfifilních kopolymerních dendrimerů v roztocích. Autorka uvažovala dendrimery mající dvě vnitřní solvofobní patra a jedno či dvě vnější solvofilní patra. Nízkomolekulární solubilizovanou látkou byl buď solvofobní monomer či tetramer. Simulace byly provedeny metodou disipativní částicové dynamiky (DPD) na silně hrubozrném modelu.

Práce je napsána přehledně, přesně a pěknou angličtinou. Z práce je patrné, že si autorka dobře osvojila DPD simulační metodu, dobře se orientuje ve studované problematice a výstižně interpretuje získané výsledky.

K práci mám dvě poznámky.

1. Str. 23, rovnice (4.17): uváděný vztah mezi DPD and FH interakčními parametry platí přísně vzato pro monomerní systémy. Pro systémy s polymery či dendrimery je proporční konstanta menší a závislá na konkrétním systému.
2. Výsledky. Jelikož hodnoty všech DPD interakčních parametrů mezi segmenty stejného typu jsou stejné ($a_{ij}^*=25$), je vhodnější při fyzikální interpretaci pracovat s $\Delta a_{ij}^*=a_{ij}^*-a_{ij}^*$ místo a_{ij}^* . $\Delta a_{ij}^*>0$ a $\Delta a_{ij}^*<0$ pak odpovídá respektivě fobicitě a filicitě dvou segmentů.

K autorce mám dva dotazy.

1. Šlo by provést (třeba i velice hrubě) namapování modelu na reálné systémy? Tj. vytvořit představu o reálné velikosti a případně chemickém složení dendrimerů a solubilizované látky či reálné časové délce simulací.
2. Množství rozpuštěné látky v dendrimeru, obr. 6.11a a 6.16a (váhová distribuce agregačních čísel). Dal by se odhadnout saturační limit pro množství rozpuštěné látky v dendrimeru na základě velikosti oblasti v dendrimeru, kde se látka rozpouští? Rozumím správně, že v obr. 6.11a a 6.16a je veškeré množství látky rozpuštěno v dendrimeru a žádná látka se nenachází v rozpouštědle?

Stanovené cíle diplomové práce byly splněny. Práce splňuje požadavky kladené na diplomovou práci a doporučuji ji k obhajobě. Navrhuji hodnotit diplomovou práci známkou **v ý b o r n ě**.

V Praze, 20.5.2015

Prof. Ing. Martin Lísal, DSc.