

Posudek diplomové práce Bc. Karla Šindelky

Self-assembly of polyelectrolytes in aqueous solutions (dissipative particle dynamics)
Spontánní asociace polyelektrolytů ve vodných roztocích (disipativní částicová dynamika)

Karel Šindelka ve své diplomové práci studoval elektrostatickou asociaci lineárních blokových kopolymerů pomocí disipativní částicové dynamiky (DPD). Při spontánní elektrostatické asociaci polyelektrolytových kopolymerů se ve srovnání se spontánní asociací blokových kopolymerů v selektivních rozpouštědlech uplatňují kromě hydrofilně-hydrofobních interakcí a konformační entropie kopolymerů ještě dlouhodobé Coulombické síly a entropie protiiontů, případně dalších iontů. Tento typ simulací je velice náročný na počítačový čas a proto je nezbytné použití modelů, ve kterých jedna modelová částice reprezentuje několik molekul či monomerních jednotek. Správná volba potenciálů a jejich vhodná parametrizace vyžaduje jednak kvalitní experimentální data a jednak dobrou teoretickou znalost chování systému za různých podmínek. Simulace pak umožňují sledovat i vlivy, jejichž experimentální studium by bylo drahé nebo složité, jako například vliv kompatibility jednotlivých bloků.


Vlastní simulace prováděl Karel Šindelka pomocí softwarového balíku DL_MESO, který je volně přístupný. Zpracování DL_MESO výstupů a jejich analýzu sám naprogramoval. Studoval vodné roztoky silných polyelektrolytových kopolymerů. Jednalo se o lineární dvoublokové kopolymery $(A^+)_5B_5$ a $(A^-)_5B_5$, které obsahovaly dobře rozpustný neutrální blok (B) a hůře rozpustný nabitý blok ($A^{+/-}$). Polovina kopolymerů byla nabitá kladně, polovina záporně. Při studiu elektrostatické asociace lineárních dvoublokových polyelektrolytových kopolymerů studoval vliv vzájemné rozpustnosti jednotlivých bloků, rozpouštědla a iontů na asociční číslo a konformaci vzniklých nanostruktur.

Karel Šindelka kromě práce s DL_MESO zvládl operační systém Linux, dávkové spuštění úloh v METACentru, gnuplot, TEX a další programy. Během práce získal Karel Šindelka původní a cenné odborné výsledky k poměrně obtížné tematice. Napočítal rozsáhlou sérii dat, z nichž byla vybrána do diplomové práce jenom část. K dobrým výsledkům, které Karel Šindelka získal v průběhu studia, přispěla spolupráce s Doc. M. Lísalem, který je konzultantem této práce. Karel Šindelka přistupuje k vědecké práci tvůrčím způsobem a svědomitě se věnuje i zpracování výsledků.

Výsledky diplomové práce jsou obsaženy v rukopise: Šindelka, K.; Limpouchová, Z.; Lísal, M.; Procházka, K.: Dissipative particle dynamics study of electrostatic self-assembly in aqueous mixtures of copolymers containing one neutral water-soluble block and one either positively or negatively charged polyelectrolyte block, který byl poslán do *Macromolecules*. Kromě toho je Karel Šindelka spoluautorem dalšího článku: Posel, Z.; Limpouchová, Z.; Šindelka, K.; Lísal, M.; Procházka, K.: Dissipative Particle Dynamics Study of the pH-Dependent Behavior of Poly(2-vinylpyridine)-block-poly(ethylene oxide) Diblock Copolymer in Aqueous Buffers, *Macromolecules* **2014**, *47*, 2503-2514.

Předložená práce je mimořádně kvalitní a splňuje všechny požadavky kladené na diplomovou práci. Diplomovou práci Karla Šindelky doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnotit známkou výborně.

V Praze 19. 5. 2014


Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.
vedoucí diplomové práce