

Posudek na disertační práci Mgr. Martina Muchy

„ *Modelování struktury a dynamiky kapalných klastrů a povrchů.* “

V této práci autor prezentuje výsledky studia struktury a dynamiky rozhraní vzduch - vodné roztoky se zaměřením na distribuci anorganických iontů v těchto strukturách. Práce obsahuje dvě části. Předmětem studia v první části je šest typů vodných roztoků: HCl, HBr, HI, NaOH, NaCl a NaI. Druhá část se zabývá chováním dikarboxylátových dianiontů v malých vodních klastrech a na rozhraní voda-vzduch. Jedná se o práci teoretickou, nástrojem studia je klasická molekulární dynamika kombinovaná s *ab initio* výpočty.

Výsledkem práce je řada originálních výsledků z nichž nejdůležitější lze shrnout v následujících bodech:

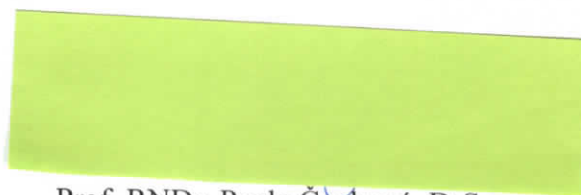
1. V práci je odhalen efekt polarizovatelnosti iontů na jejich chování ve vodných roztocích, speciálně na jejich distribuci na rozhraní voda-vzduch.
2. Chování malých nepolarizovatelných iontů jako jsou kationty alkalických kovů se liší od chování snadno polarizovatelných anionů. Zatímco první jsou odpuzovány od rozhraní voda-vzduch ve vodných elektrolytech, polarizovatelné aniony mají silnou tendenci se koncentrovat na rozhraní.
3. Výsledky práce jsou konfrontovány s experimentem a to s fotoelektronovou spektroskopií, hmotnostní spektroskopií, rentgenovou synchrotronovou reflektometrií a výsledky výpočtů jsou konzistentní s výsledky experimentu.

Výsledky jsou předmětem sedmi publikací v impaktovaných časopisech. Jedná se o práci obsahově bohatou, zvolená tematika je vysoce aktuální a metodika studia je vhodně volená a navíc dále propracovaná.

K obsahu ani k formě práce nemám připomínky, které by jakkoliv snižovaly její hodnotu. Jako téma pro diskusi k obhajobě doporučuji autorovi, aby více rozvedl v závěru zmíněné konsekvence svých výsledků na atmosférické jevy a technologické procesy a zasadil tak celou práci do širšího rámce přírodovědného bádání a možného praktického využití.

Práce po všech stránkách splňuje požadavky, kladené na doktorskou disertační práci a proto ji doporučuji k obhajobě a jejímu autorovi udělení titulu PhD.

18.8.2006



Prof. RNDr. Pavla Čápková, DrSc