

Posudok školiteľa bakalárskej práce

“Interakce slabých polyelektrolytů s multivalentními ionty”

študenta Romana Staňa

Predložená bakalárska práca popisuje simulácie ionizačného správania slabých polykyselín v zriedených roztokoch v prítomnosti uni-univalentného elektrolytu, označovaného NaCl, a v prítomnosti elektrolytov s multivalentným katiónom, MCl_2 a MCl_3 , ktorý je protiiónom polyelektrolytu.

Hlavným výsledkom práce je, že prítomnosť multivalentných protiiónov posúva titračnú krivku polyelektrolytu bližšie k ideálnej titračnej krivke. Tento posun však nie je dôsledkom ideálneho správania študovaného systému, ale kompenzácie dvoch silných neideálnych efektov. Na jednej strane je to vzájomná repulzia nabitých skupín na reťazci polyméru, na druhej sú to korelácie medzi multivalentnými protiiónmi a nábojmi na polymernom reťazci. Tieto korelácie vedú ku kondenzácii multivalentných protiiónov, ktoré kondenzujú omnoho ochotnejšie než monovalentné ióny. Protiióny skondenzované na reťazci efektívne oslabujú vzájomnú repulziu ionizovaných skupín polyelektrolytu a znižujú tak bariéru ktorá bráni ďalšej ionizácii. Je pomerne zložité popísať tento jav pomocou analytickej teórie, pretože so zmenou ionizácie a s kondenzáciou protiiónov dochádza i k zmene konformácie polyméru. Molekulové simulácie, použité v tejto práci, sú preto ideálnym nástrojom, ktorý umožňuje zahrnúť vplyv interakcií i konformačných zmien polyméru na jeho ionizačné správanie.

V rámci práce sa autor oboznámil s metodickými a praktickými aspektmi molekulových simulácií. Na tieto simulácie používal program *pe*, ktorý vyvinul doc. Uhlík. Autor práce implementoval štatistické spracovanie výsledkov v programe *Octave*. Predpokladáme, že po rozšírení a doplnení o ďalšie simulované systémy sa výsledky z tejto práce stanú základom odbornej publikácie.

Pre účely bakalárskej práce sme zámerne zvolili jednoduchý modelový systém, na ktorom sa Roman oboznámil s teoretickým popisom ionizácie slabých polyelektrolytov v roztokoch a s popisom ich interakcií s menšími iónmi. Predpokladáme, že v rámci diplomovej práce tieto znalosti ďalej využije pri štúdiu zložitejších systémov v návaznosti na konkrétne experimenty.

Z pohľadu školiteľa by som rád vyzdvihol Romanovu schopnosť precízne formulovať odborný text s veľmi dobrou logickou štruktúrou. Pri tvorbe textu práce, spracovaní a interpretácii výsledkov vykazoval vysokú mieru samostatnosti, ktorá predčí i niektorých študentov v doktorských programoch.

Na základe vyššie uvedeného navrhujem hodnotenie práce známku výborný.

Peter Košovan, 31.5.2018