

## Posudek oponenta bakalářské práce

Autor: Roman Staňo

Studijní obor: Chemie

Název práce: Interakce slabých polyelektrolytů s multivalentními ionty

Oponent: RNDr. Jan Heyda, Ph.D.

Předložená bakalářská práce se zabývá chováním slabého polyelektrolytu v přítomnosti solí a implicitního rozpouštědla. Použitím techniky Monte Carlo v reakčním souboru byl studován pro různé hodnoty pH stupeň disociace a gyrační poloměr polyelektrolytu a související distribuce iontů v jeho okolí. Výpočty byly provedeny nejen pro uni-univalentní sůl, reprezentující NaCl, ale také pro di- a trivalentní kationty. Práce se zabývá výlučně systémy s velmi nízkou iontovou silou.

Bakalářská práce je čtivá a od samotného úvodu velmi dobře zpracovaná. Standardním částem výpočetní chemie (silové pole, MC, MD) věnuje jen nezbytný prostor a podrobněji se věnuje preciznímu uvedení pokročilejších technik a méně známých parametrů, které jsou dále v textu využívány. Stručně a zároveň srozumitelně jsou prezentovány metody a popis simulovaných systémů, stejně jako způsob analytického zpracování simulačních dat.

Výsledky práce jsou přehledně prezentovány ve formě grafů a tabulek, vztaženy k výsledkům, které byly publikovány v recentní literatuře a I s jejich pomocí jsou získané výsledky přesvědčivě interpretovány. Rád bych kandidátovi položil 3 níže formulované otázky, ke kterým se může vyjádřit; např. během své prezentace.

1) Na obrázku 4.7 a 4.8 je vynesena závislost stupně disociace,  $\alpha$ , resp. gyračního poloměru  $R_g$  na  $\text{pH} - \text{pK}_a$  pro studované podmínky (tj. systém bez soli, a různé typy solí). Vzhledem k tomu, že obě závislosti jsou korelovány, bylo by vhodné provést výnos  $\alpha(R_g)$  a porovnat/diskutovat její průběh v různých solích.

2) Mohl by se kandidát pokusit na kvalitativní úrovni vysvětlit fyzikální (elektrostatický) původ škálování ( $r^{-1}$ ,  $r^{-2}$ ) radiální distribuční funkce v různých oblastech "r", jak je zobrazeno a diskutováno v obrázku 4.3.

3) Při pohledu na obrázek 4.9 a 4.10 se zdá, že koncentrace soli obsahující 2+, resp. 3+ kationty nedosáhla své průměrné hodnoty. Jakým "bulkovým" koncentracím tedy tyto dvě simulace ve skutečnosti odpovídají? Jakým způsobem by bylo možné tento problém vyřešit, či obejít?

Zpracování práce působí velmi vyzrálým dojmem, všechny veličiny jsou přehledně definovány. Práce je dokonce doplněna o seznam použitých symbolů. I přes svůj 50 stránkový rozsah je práce prakticky bez překlepů. Jedinou typografickou výtkou by bylo nesprávné vysázení desetinné čárky.

Z výše uvedeného je patrné, že předloženou práci plně doporučuji k obhajobě a hodnotím ji známkou výborně.

V Praze, 31.5.2018

Jan Heyda