

Počítačová simulace elektromigrace

Téma bakalářské práce Libora Veise spadá do oblasti, které se skupina prof. Gaše věnuje již řadu let, přesto je to téma stále aktuální. Zakomponování dalších dějů (např. tvorby komplexů s micelami) do matematického modelu elektromigrace přinese velmi významné rozšíření aplikace simulačních programů.

V teoretické části autor podává přehled dosud publikovaných počítačových simulací elektromigrace se zaměřením především na simulaci dynamiky procesů probíhajících při elektromigračních kapilárních technikách. V praktické části využívá programu Simul 5 rozšířeného o tzv. micelární mód k simulaci speciálních jevů – nakoncentrování analytu na pH rozhraní a tzv. sweepingu – tedy nakoncentrování a následné migraci původně prakticky neutrálního analytu v důsledku vytvoření komplexu s nabitými micelami.

Předložená bakalářská práce svědčí o tom, že se Libor Veis v zadané náročné tématice velmi dobře zorientoval, pronikl hluboko do teorie i řešení matematického modelu a mohl tak plně využít možností programu Simul 5. Práce je sepsána pečlivě, má vynikající grafickou úroveň a navíc je doplněna animací simulovaných procesů (na CD), která kompenzuje poměrně stručný popis praktické části.

K práci mám několik připomínek:

- Rešeršní část obsažená v kap. 1 a teoretický popis programu Simul v kap. 2 jsou součástí cíle práce. Vytýčení cíle práce až v kap. 3 mi připadá nelogické.
- V názvech, které jsou tvořeny dvěma vlastními jmény, má i první jméno formu přivlastňovacího zájmena – př. Onsagerova-Fuossova teorie.
- Formulace v 2.odst. na str. 17 týkající se korekce na iontovou sílu je nepřesná. Hodnoty koncentrací se nekorigují na iontovou sílu „za účelem získání aktivit“, ale naopak z termodynamických disociačních konstant vyjádřených pomocí aktivit jednotlivých složek je třeba získat hodnoty jejich koncentrací.
- Předpokládám, že hodnoty pohyblivostí uvedené na str. 21 jsou $40 \cdot 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$, nikoliv $40 \text{ m}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$.
- Ke zvýšení názornosti a pochopení popisovaných simulací by velmi přispělo zobrazení počáteční konfigurace. Popis na str. 21 „SDS nalevo od analytu“ čtenáři neřekne nic, není-li uvedeno, kterým směrem SDS migruje. Podobně počáteční koncentrační profil kyseliny benzoové na obr. 4.4. není patrný. Přestože lze tyto údaje „vypozorovat“ z animací, mohly by být uvedeny i v textu.

Dále autora prosím o zodpovězení následujících dotazů:

- Co znamená „nejvyšší a nejnižší limita disociace dané látky“ (str. 17)?
- Jaké experimentální uspořádání představuje „záporná polarita“, která je uváděna jako jeden ze zadávaných parametrů simulace (např. na str. 21)?
- Proč byla pro výpočet procentuálního zastoupení analytu vázaného v micelách zvolena rovnovážná koncentrace micel 10 mmol dm^{-3} (str. 21), když v simulacích s použitou koncentrací SDS 10 mmol dm^{-3} bude tato hodnota výrazně nižší?
- Vycházejí zvolené hodnoty pK tvorby komplexů kyseliny benzoové s micelami SDS z nějakého odhadu skutečných hodnot?

Na závěr velmi ráda konstatuji, že předložená práce bezpochyby splňuje požadavky kladené na bakalářskou práci a doporučuji ji k obhajobě.

V Praze, 15.6.2006

Iva Zusková