

Školitelský posudek na bakalářskou práci Libora Veise „Počítačová simulace elektromigrace“

Počítačová simulace elektromigrace, přestože hluboce zasahující do teorie elektromigrace, není pouze nástrojem pro teoretické úvahy, ale má i značný praktický význam. Při podrobné znalosti všech aspektů elektromigrace je možné činit závěry, povedou k zlepšení separace – větší účinnosti nebo lepšímu rozlišení. Počítačová simulace je nástroj pro optimalizaci separace bez použití „mokrě“ chemie,

Úkolem Libora Veise bylo podat rešerši dosavadního vývoje v počítačové simulaci. Dále měl simulovat a pokusit se optimalizovat podmínky pro kumulaci (nakoncentrování) kyseliny benzoové a sorbové na rozhraní dnou elektrolytů, které mají různé pH. Takovýto postup by umožnil analýzu těchto dvou kyselin mnohonásobně citlivější, což by bylo obzvláště důležité při analýze některých chemicky konzervovaných potravin.

Toto zadání Libor Veis splnil a provedl velké množství simulací, některých časově velmi náročných a obtížných, které ukázaly, jaký je mechanismus akumulace na rozhraní fosfátového pufru (pH = 2,5) a borátového pufru (pH = 9,5). Pracoval velmi samostatně a dokonale porozuměl náročnému matematickému modelu, na kterém jsou simulace založeny.

Práce je velmi dobře napsaná a doporučuji její přijetí jako práci bakalářskou.

V Praze, 19. června 2006


Bohuslav Gaš

školitel