

## Oponentský posudek disertační práce Karla Šindelky „**Studium asociačního chování amfifilních kopolymerů v roztocích obsahujících nízkomolekulární látky pomocí počítačových simulací**“

Disertační práce Karla Šindelky pojednává o problematice „elektrostatické asociace v polymerních roztocích obsahujících blokové polyelektrolytové kopolymery spolu se surfaktanty, neutrálními homopolymery nebo jinými opačně nabitými polyelektrolyty.“ Je třeba zdůraznit, že jde v první řadě o práci teoretickou založenou na mezoskopických simulacích komplexních kapalin - coarse grain MD simulací či Dissipativní částicové dynamiky (DPD) která je ve své podstatě kombinací MD, Brownovské dynamiky a lattice gas automata. A právě použití tzv coarse grain aproximace je kompromisem mezi proveditelností simulací a atomistickým rozlišením studovaných jevů. Práce samotná není předkládána ve formě autoreferátu s příloženými publikacemi jak bych očekával k nadprůměrné publikační činnosti kandidáta, ale je ve formě klasické – tedy teoretického úvodu, metodiky simulací a výsledků s diskusí. Závěrečné kapitoly „Summary“ a „Conclusions“ znovu přehledně zdůrazňují čeho bylo v disertaci dosaženo. Na můj dotaz proč kandidát nevolil jednodušší formu předkládané disertace mi bylo sděleno, že jde vlastně o dosud nepublikované výsledky a předkládaná práce je tedy jejich první prezentací.

Práce je psána dobrou angličtinou s minimem nepřesností a překlepů, její úprava, členění i zařazení obrázků je přehledné a graficky na vysoké úrovni. Jednotlivé části jsou od sebe výrazně odděleny a členění na podkapitoly je děláno účelně. Oceňuji zvláště části vysvětlující teoretické základy metod a část kde se autor věnuje simulačním detailům. V některých případech je však v části výsledků množství informací poměrně zhuštěné a vyplatilo by se redukovat. Na druhou stranu tak jak je tato kapitola strukturována nyní i s množstvím výsledků je asi disertační práce jediná platforma kde mohou být všechny výsledky uvedeny v kontextu a nikoli formou různých supplements. Přesto mě počet obrázků – celkem 81 připadá příliš vysoký i když jde ve spoustě případů o tytéž závislosti ilustrované na jiných systémech.

Práce se věnuje třem oblastem – chování polymerů v nestechiometrických směsích PE kopolymerů s nekompatibilními bloky, chování polymerů v nestechiometrických směsích diblokových polyelektrolytových kopolymerů s opačně nabitými homopolyelektrolyty a konečně studiu spontánní asociace poly(N-isopropylakrylamidu) modifikovaného karboxylovou a dodecylovou koncovou skupinou a jeho koasociace s kationtovým surfaktantem. A právě poslední ze studovaných oblastí vyvolává řadu otázek na které bych v rámci diskuse rád slyšel odpovědi.

- 1) Kandidát hovoří o tom, že pomocí DPD simulací byly zreprodukovány výsledky experimentálních měření spontánní asociace. Posléze připouští, že dost rozdílné výsledky simulací a experimentálních měření (viz obrázek 5.72) pro velká množství přidaného surfaktantu souvisí se specifickými interakcemi – konkrétně s vodíkovými vazbami. Navržená korekce demonstrována na hypotetickém triblok kopolymeru sice přinesla zlepšení, ale rozhodně to není důkaz systémového řešení problému. Jak by podle kandidáta mělo takové systémové řešení vypadat?
  
- 2) V práci je poměrně zanedbatelná část věnována experimentálním metodám které jsou s výsledky počítačových simulací srovnatelné. Rád bych slyšel jaké spektrum experimentálních metod se na studium polymerů používá a jaké je jejich rozlišení. Dynamický rozptyl světla je například jedna z metod která se často využívá, nicméně vzhledem k poměrně širokým distribucím objemových charakteristik agregátů bych rád věděl jak konkrétně jsou výsledky srovnávány se simulacemi. Přestože teoretický popis neumožňuje atomistické rozlišení je možné že by experimentální metody které na úrovni atomistického rozlišení pracují přinesly něco nového?
  
- 3) Poslední připomínka nebo dotaz se týkají deklarované neproveditelnosti atomistických simulací. Jaké jsou hlavní důvody této neproveditelnosti? Je to výpočetní čas? Nebo nedostatečná kapacita výpočetních prostředků? Nebo jde o špatnou parametrizovatelnost studovaných systémů? Dovedu si představit že parametrizace counterions může být poměrně náročná, na druhou stranu mi není úplně jasné jaké counterions se v experimentech používají. Pokud by šlo například o Na nebo K a Cl je parametrizace poměrně dobrá což ovšem není pravda pro ostatní ionty.

Závěr: považuji předloženou disertační práci Karla Šindelky za kvalitní a doporučuji ji proto k obhajobě a dalšímu řízení.

Praha 23.8.2018

.....

RNDr Jiří Vondrášek CSc