

The study of the association behaviour of the amphiphilic copolymers in solutions containing low molar compounds by means of computer simulations.

Studium asociačního chování amfifilních kopolymerů v roztocích obsahujících nízkomolekulární látky pomocí počítačových simulací

1. Výsledky zahrnuté v disertační práci byly publikovány v následujících článcích:

- Posel, Z.; Limpouchová, Z.; Šindelka, K.; Lísal, M.; Procházka, K.: Dissipative particle dynamics study of the pH-dependent behavior of poly(2-vinylpyridine)-block-poly(ethylene oxide) diblock copolymer in aqueous buffers. *Macromolecules*, 2014. **47**(7), 2503–2514. ISSN 0024-9297. (K. Šindelka prováděl a zpracovával část simulací.)
- Šindelka, K.; Limpouchová, Z.; Lísal, M.; Procházka, K.: Dissipative particle dynamics study of electrostatic self-assembly in aqueous mixtures of copolymers containing one neutral water-soluble block and one either positively or negatively charged polyelectrolyte block. *Macromolecules*, 2014. **47**(17), 6121–6134. ISSN 0024-9297. (K. Šindelka prováděl a zpracovával simulace a podílel se na sepisování manuskriptu.)
- Šindelka, K.; Limpouchová, Z.; Lísal, M.; Procházka, K.: The electrostatic co-assembly in non-stoichiometric aqueous mixtures of copolymers composed of one neutral water-soluble and one polyelectrolyte (either positively or negatively charged) block: a dissipative particle dynamics study. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016. **18**(24), 16137–16151. ISSN 1463-9076. (K. Šindelka prováděl a zpracovával simulace a podílel se na sepisování manuskriptu.)
- Procházka, K.; Šindelka, K.; Wang, X.; Limpouchová, Z.; Lísal, M.: Self-assembly and co-assembly of block polyelectrolytes in aqueous solutions. Dissipative particle dynamics with explicit electrostatics. *Mol. Phys.*, 2016. **114**(21), 3077–3092. ISSN 0026-8976. (K. Šindelka prováděl a zpracovával simulace.)
- Lísal, M.; Šindelka, K.; Suchá, L.; Limpouchová, Z.; Procházka, K.: Dissipative particle dynamics simulations of polyelectrolyte self-assemblies. Methods with explicit electrostatics. *Polym. Sci. Ser. C*, 2017. **59**(1), 77–101. ISSN 1811-2382. (K. Šindelka prováděl a zpracovával simulace.)
- Fanova, A.; Šindelka, K.; Uchman, M.; Limpouchová, Z.; Filippov, S.; Pispas, S.; Procházka, K.; Štěpánek, M.: Co-assembly of poly(N-isopropylacrylamide) with dodecyl and carboxyl terminal groups with cationic surfactant: Critical comparison of experimental and simulation data. *Macromolecules*, 2018, accepted. (K. Šindelka prováděl a zpracovával simulace a podílel se na sepisování manuskriptu.)

2. Doplňující text

- str. 68 – věta “Simulation results were inspired by and compared with experimental measurements of light and X-ray scattering.” má být doplněna: “Simulation results were inspired by and compared with experimental measurements of light and X-ray scattering **performed by A. Fanova and M. Štěpánek.**”
- obrázek 5.72 na str. 76 – legenda má být doplněna o text: “Experimental measurements were performed by A. Fanova and M. Štěpánek.”

3. Opravy překlepů a typografických chyb

- rovnice (3.2) na str. 11 má mít tvar:

$$\mathbf{F}_{ij}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{v}_{ij}) = \mathbf{F}_{ij}^{\text{C}}(\mathbf{r}_{ij}) + \mathbf{F}_{ij}^{\text{D}}(\mathbf{r}_{ij}, \mathbf{v}_{ij}) + \mathbf{F}_{ij}^{\text{R}}(\mathbf{r}_{ij})$$

- rovnice (3.3) na str. 11 má mít tvar:

$$U_{ij}^{\text{C}} = \begin{cases} \frac{a_{ij}}{2} r_c \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right)^2 & \text{for } r_{ij} \leq r_c \\ 0 & \text{for } r_{ij} > r_c \end{cases}$$

- rovnice (3.13) na str. 12 má mít tvar:

$$\mathbf{F}_{i,i+1}^{\text{S}} = k_s (r_{i,i+1} - r_0) \mathbf{e}_{ij}$$

- str. 3 – větu “In non-stoichiometric mixtures of PEs with incompatible blocks, co-assembled nanoparticles are smaller than in stoichiometric mixtures and are charged.” opravuji na “...are smaller than in stoichiometric mixtures and **these nanoparticles** are charged.”
- str. 6 – větu “Self-assembled nanoparticles (e.g., micelles, vesicles, or multicompart-ment aggregates) **are** find applications...” opravuji na “Self-assembled nanoparticles (e.g., micelles, vesicles, or multicompart-ment aggregates) find applications...”
- str. 10 – větu “DPD is basically a combination of MD, Brownian dynamics, and lattice gas automata [51] an uses statistical mechanics...” opravuji na “...lattice gas automata [51] **and** uses statistical mechanics...”
- str. 13 – větu “The velocity prediction, $\tilde{\mathbf{v}}_i$, is needed because the forces are velocity-dependant.” opravuji na “...because the forces are velocity-**dependent**.”