

Posudek diplomové práce Bc. Petry Bačové

Lineární semiflexibilní polyelektrolyty v roztocích

Linear semiflexible polyelectrolytes in solutions

Petra Bačová ve své diplomové práci studovala konformační chování lineárních semiflexibilních polyelektrolytů v zasolených roztocích pomocí počítačových simulací. U semiflexibilních polyelektrolytů na rozdíl od polyelektrolytů tuhých a flexibilních, jejichž konformační chování bylo teoreticky zpracováno již dříve, neexistuje dosud teorie vysvětlující uspokojivě jejich konformační chování, přestože je mu v posledních letech v souvislosti se studiem DNA a dalších biopolymerů věnována velká pozornost. Úloha počítačových simulací je zde nezastupitelná, protože umožňují analyzovat jak důsledky teoretických předpokladů, tak odděleně jednotlivé efekty a přispívají k lepšímu porozumění a současně pomáhají i při interpretaci experimentálních dat.

Vlastní simulace prováděla Petra Bačová pomocí softwarového balíku ESPResSo, který naše skupina získala na základě mezinárodní spolupráce. Petra Bačová zvládla práci s ESPResSem velmi dobře – rozumí funkci jeho jednotlivých součástí a je schopna doprogramovat nové funkce podle potřeby. Kromě práce s ESPResSem zvládla operační systém linux, dávkové spouštění úloh v METACentru, gnuplot, TEX a další programy. Napočítala rozsáhlou sérii dat, z nichž byla vybrána do diplomové práce jenom část.

Konformační chování polyelektrolytů studovala v roztocích lišících se koncentrací soli a iontovou silou. Konformační chování bylo charakterizováno především pomocí perzistenční délky. Přehledová část práce proto obsahuje kromě popisu simulačních metod, modelů polymerního řetězce a uvažovaných interakčních potenciálů i přehled nejčastěji používaných definic perzistenční délky. Výsledky simulací jsou porovnány s Odijk-Skolnick-Fixmanovou teorií a se závěry variačních výpočtů Mangiho a Netze. Výsledky potvrzují dvouexponenciální průběh orientační korelační funkce plynoucí z teorie. Je analyzována role vnitřní a elektrostatické perzistenční délky a je podrobně diskutován jejich vliv na konformační chování.

Petra Bačová se zapojila do práce v našem týmu již ve druhém ročníku a od samého začátku pracovala s velkým zaujetím, iniciativně a samostatně. Je neobvykle pečlivá a výkonná a patří mezi nejlepší diplomanty, kteří v naší skupině pracovali. Během práce získala Petra Bačová původní a cenné odborné výsledky k poměrně obtížné tematice. Výsledky své práce prezentovala již během studia ve dvou přednáškách a ve dvou posterech na mezinárodních konferencích (Liquid Matter Workshop 2008, Zdislavice, Czech Republic, 18.-21.9.2008, přednáška Persistence length of polymers; Liquid Matter Workshop 2009, Tábor, Czech republic, 22.-24.10.2009, přednáška Bending rigidity of polyelectrolytes; Polyelectrolytes 2008, Coimbra, Portugal, 16-19. June 2008, poster; Mainz Materials Simulation Days, Mainz, Germany, June 3.-5.2009, poster). V současné době připravujeme publikaci z výsledků obsažených v její diplomové práci. Předložená práce je mimořádně kvalitní a splňuje všechny požadavky kladené na diplomovou práci. Diplomovou práci Petry Bačové **doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnotit známkou výborně.**

V Praze 20. 5. 2010


Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.
školicelka