

Název práce: Lineární semiflexibilní polyelektrolyty v roztocích

Autor: Petra Bačová

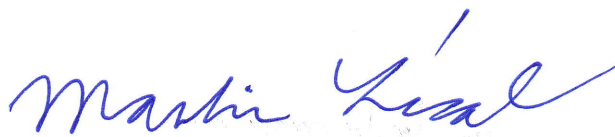
V diplomové práci autorka studuje konformační chování modelových lineárních nabitých polymerů v roztocích. Konformační chování je studováno pomocí Brownovské dynamiky (implicitní rozpouštědlo) v roztocích s proměnou koncentrací soli. *Hlavní přínos diplomové práce spatřuji v zaměření se (i) na semiflexibilní polyelektrolyty, které nejsou tak systematicky prostudovány jako flexibilní či tuhé polyelektrolyty a (ii) na testování a diskuzi různých definic/teorií perzistenční délky.*

Vlastní práce je rozdělena do sedmi kapitol. V kapitole 1 a 2 autorka formuluje motivace a cíle diplomové práce. Kapitola 3 nás seznamuje s filozofií vytváření modelových polymerů. Kapitola 4 pak detailně popisuje model semiflexibilních polyelektrolytů a simulační metodu použitou v diplomové práci. Zde jen postrádám zmínku o způsobu výpočtu dlouhodobých elektrostatických interakcí v simulacích. Kapitola 5 přehledně shrnuje definice/teorie perzistenční délky. V kapitole 6 jsou prezentovány a diskutovány simulační výsledky. Pro kapitolu bych doporučil výstižnější název "Results and Discussion". Dosažené výsledky práce jsou shrnuty a charakterizovány v kapitole 7.

Celkový dojem z diplomové práce je velice pozitivní. Práce je napsána stručně a zároveň srozumitelně a jasně. (Několik málo drobných typografických chyb jsem s autorkou probral osobně.) Kapitola 6 týkající se popisu a diskuze simulačních výsledků demonstruje velké množství vynaloženého úsilí a velmi dobrou orientaci ve studované problematice. Vytčených cílů bylo dosaženo a práce splňuje nároky kladené na diplomovou práci. Diplomovou práci hodnotím známkou **v ý b o r n ě**.

Náměty na případnou diskuzi:

1. Jak byly počítány dlouhodobé elektrostatické interakce v simulacích?
2. Velikost boxu, jak zmiňuje autorka na str. 18, musí být dostatečná, aby nedocházelo k ovlivnění segmentů polyelektrolytu vlivem periodických okrajových podmínek. Existuje či bylo použito nějaké empirické kritérium, které např. předepisuje kolikrát musí být délka boxu větší než charakteristická délka polyelektrolytu?
3. Jak dobře při daném integračním kroku funguje Langevinův termostat? T.j. jak např. přesně souhlasí simulovaná kinetická teplota, rov. (4.10), se vstupní teplotou?
4. Brownovská dynamika nezachovává celkovou hybnost systému, t.j. $\mathbf{P} = \sum_i m_i \mathbf{v}_i \neq \text{konst.}$ Působí toto nějaké problémy např. "tečení" systému během simulací?
5. Jakým reálným systémům by odpovídaly modelové systémy studované v této diplomové práci?



V Praze dne 14.5.2010

Doc. Ing. Martin Lísal, DSc.