Posudek diplomové práce Bc. Lucie Suché

Interaction of branched copolymers with low molar compounds - Dissipative particle dynamic study

Interakce větvených kopolymerů s nízkomolekulárními sloučeninami - studie pomocí disipativní částicové dynamiky

Lucie Suchá se ve své diplomové práci zabývala solubilizací nízkomolekulárních látek do kopolymerních dendrimerů v selektivních rozpouštědlech. Kopolymerní dendrimery jsou relativně dobře definované systémy, jsou citlivé na řadu vnějších podnětů a tvoří nanostruktury i při nekonečném zředění. Díky své mnohonásobně se větvící architektuře jsou mimořádné vhodné jako nanokontejnery pro nejrůznější účely a je jim proto v současné době věnována velká pozornost. Studovaný systém solvofobní látky v selektivním rozpouštědle dendrimeru je relativně jednoduchý a přesto či právě proto umožňuje studovat základní termodynamické chování (vliv kvality rozpouštědla, chemického složení a architektury jak dendrimeru tak i nízkomolekulární látky).

Vlastní simulace prováděla Lucie Suchá metodou disipativní částicové dynamiky (DPD) pomocí softwarového balíku DL_MESO, který je volně přístupný a se kterým se naučila zacházet už v průběhu bakalářské práce. Zpracování DL_MESO výstupů a jejich další analýzu naprogramovala sama v C++. Z nasimulovaných dat byla do diplomové práce vybrána jenom část, zbývající část bude využita při její další práci.

Lucie Suchá studovala solubilizaci monomeru a tetrametru do dendrimeru se dvěma solvofobními vnitřními patry a jedním nebo dvěma solvofilními vnějšími patry. Pomocí DPD simulací prokázala, že samotná solvofobicita nestačí, protože u silně solvofobních látek dojde dříve k jejich vysrážení než k solubilizaci do dendrimeru. Pro prakticky využitelnou solubilizaci je nezbytné, aby solvofobní blok dendrimeru byl pro nízkomolekulární látku velmi dobrým rozpouštědlem. Množství nízkomolekulární látky solubilizované do dendrimeru roste s její koncentrací. Při vyšších koncentracích však dochází kromě solubilizace také k adsorpci této látky na povrch jádra dendrimeru. Adsorpci monomeru lze potlačit použitím dendrimeru se dvěma solvofilními patry. Prodlužování lineárních polymerních úseků dendrimeru umožňuje solubilizaci většího množství monomeru, ale popsané trendy se nemění. DPD simulace dále ukázaly, že oligomerní řetězce (tetramery) se solubilizují při nižších koncentracích než monomer a v roztoku téměř nezůstávají. Při vyšších koncentracích, při kterých by docházelo k vysrážení solvofobního tetrametru, dojde místo toho v roztoku obsahujícím dendrimer k jeho adsorpci na jádro dendrimeru. Celkově lze získané výsledky shrnout, že z aplikačního hlediska jsou perspektivní především dendrimery s relativně dlouhými lineárními úseky, s několika vnějšími solvofilními patry a s vnitřním solvofobním patrem, ve kterém je solubilizovaná látka velmi dobře rozpustná.

Lucie Suchá patří k nejlepším diplomantům, kteří v naší skupině pracovali. Do práce v našem týmu se zapojila již ve druhém ročníku a od samého začátku pracovala s velkým zaujetím a samostatně. Její přístup k vědecké práci je zodpovědný, důkladný a přitom tvůrčí. Během práce získala původní a cenné odborné výsledky, které prezentovala již během studia na dvou posterech na mezinárodních konferencích. V současné době připravujeme publikaci z výsledků obsažených v její diplomové práci. Kromě toho se Lucie Suchá již druhým rokem jako člen týmu podílí na řešení studentského grantového projektu GA UK 328514 „Studie hydrodynamického a konformačního chování větvených polymerů (polymerů s topologií H a dendrimerů) v dobrých rozpouštědlech“, řešitel X. Wang.

Předložená práce je mimořádně kvalitní a splňuje všechny požadavky kladené na diplomovou práci. Diplomovou práci Lucie Suché **doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnotit známkou výborně**.

V Praze 20. 5. 2015

Doc. Ing. Zuzana Limpouchová, CSc.
školitelka