

**Posudek oponenta na diplomovou práci Bc. Karla Šindelky**  
***Self-assembly of polyelectrolytes in aqueous solutions***  
***(dissipative particle dynamics)***

Předložená práce se zabývá aplikací metody DPD na polyelektrolyty. Tato metoda je motivována snahou zlevnit standardní atomistické simulace natolik, abychom mohli simulovat velké a složité systémy, včetně nabitých. V úvodu jsou popsány jak studované polyelektrolyty tak metoda DPD. Značná část práce se zabývá metodikou modelování Coulombovy interakce v DPD, což nebylo dosud dostatečně prozkoumáno. Následuje aplikace na směs blokových polyelektrolytů.

Práce je psána dobrou angličtinou s minimem překlepů a dalších chyb. Spíše jako smůlu lze hodnotit překlep “dissipave” na titulní stránce. Plyne z toho ponaučení, že projet hotový text korekterem pravopisu se vždy vyplatí. Typografická úroveň práce je vynikající. Práci jsem četl v PDF formě, a tak oceňuji živé odkazy.

Komentáře a náměty pro diskusi:

- Jako nepřehledné z hlediska čtenáře hodnotím použití redukováných jednotek a hlavně Bjerrumovu délku k nastavení velikosti interakce, viz “The strength of the electrostatic interactions in these simulations was controlled by the Bjerrum length.” na str. 31 a (bez vysvětlení) na str. 29 nahoře. Dle definice na str. 12 platí  $l_B = e^2/(4\pi\epsilon k_B T)$ , kde mohu měnit  $\epsilon$ , tj. rozpouštědlo (ale pak musím změnit i parametry interakce článek–rozpouštědlo) a teplotu. Rozsah použitých  $l_B$  je přitom přes jeden řád (0.5 až 7), což neodpovídá realistickému rozsahu teplot.
- Str. 17, rov. (3.14): rychlost  $\tilde{\mathbf{v}}_i$  by měla být v čase  $t + \Delta t$ .
- Práce používá exponenciální stínění náboje (Slater-type charge distribution, eq. (3.20)). Je pro to nějaký další důvod (jako lepší aproximace hrubozrného potenciálu)? Na základě svých zkušeností bych dal přednost Gaussovskému náboji, protože se snadno implementuje s Ewaldovou sumací.
- Byly provedeny simulace s mřížkovými modely obdobných PE systémů? Pokud ano, jaké jsou výsledky?

Další drobnosti:

- V abstraktu je použita zkratka PE bez definice. Je to matoucí, protože PE je obvyklá zkratka pro polyetylen, a zde znamená polyelektrolyt. Je dobrým stylem nepoužívat v abstraktu žádné zkratky kromě zcela obvyklých v širokém oboru.
- Str. 12, ř. –4: lépe “elementary charge”.
- Abstrakt: co takhle „hrubozrný“ místo „zhrubený“?

Na závěr konstatuji, že diplomant odvedl nadstandardně velké množství práce a i přes drobné výše zmíněné výtky (o kterých je ostatně možné diskutovat) je práce velmi kvalitní.

*Práci jsem prostudoval a doporučuji ji k obhajobě. Navrhuji známku „výborně“.*

V Praze dne 18. 5. 2014

prof. RNDr. Jiří Kolafa, CSc.  
Ústav fyzikální chemie, VŠCHT Praha