



## Posudek oponenta disertační práce

Jméno a příjmení uchazečky: **Alena Habartová**

Název práce: **Investigation of monomolecular organic layers and their interaction with atmospheric oxidants and pollutants**

Předložená práce se věnuje výsledkům studia monovrstev haloalkanů a kyseliny palmitové na povrchu vody a ledových nanočástic pomocí simulací molekulové dynamiky. Práce je rozdělena na pět kapitol. První kapitola (Introduction) je stručný úvod do problematiky, druhá přináší užitečnou informaci o použitých metodách studia, zejména molekulární dynamice, ale i komplementárních experimentálních technikách. Následující tři části předkládají výsledky výzkumu doktorandky: studie interakcí halogenvodíků s povrchem vody a ledových nanočástic, simulace monovrstvy kyseliny palmitové a studie interakcí monovrstvy kyseliny palmitové a haloalkanů. Práce přináší mnoho zajímavých výsledků, které zajisté posouvají poznání v užším základním oboru a mohou být zajímavé i pro interdisciplinární oblasti, jako jsou atmosférická nebo materiálová chemie.

Práce je napsána velmi přehledně a popisuje kvalitně a pečlivě provedené experimenty a výsledky výzkumu. Diskuse zajímavých výsledků je na vysoké odborné úrovni. Popis použitých teoretických metod je podán natolik didakticky, že byl čtivý i pro oponenta, který je experimentálním chemikem. Práce je navíc napsána velmi zdařile anglicky; v textu se objevují pouze marginální gramatické a syntaktické chyby. Text má velmi dobrou grafickou i formální úpravu. K práci jsou přiloženy čtyři publikace, z nichž dvě již vyšly v renomovaných odborných časopisech.

Kromě níže uvedených otázek, mám několik obecných připomínek k práci. Domnívám se, že by kapitola Introduction mohla být delší a podrobnější, aby čtenáře více uvedla do studované problematiky a současného stavu poznání; dále jsem postrádal cíle (zadání) práce. Pak se domnívám, že název disertační práce ne zcela odpovídá popisované práci; výsledky studia interakcí atmosférických oxidantů jsem v práci nenašel.



Do diskuse mám následující poznámky a otázky.

- (str. 19) V práci se uvádí, že chlormethan je orientován na povrchu vody tak, že atom chloru kontraintuitivně směřuje mimo něj. Halogenová vazba s vodou byla v literatuře demonstrována na mnoha příkladech, ale nevím, zdali daná MD metodika tento typ interakce umí simulovat. Jaké je vysvětlení tohoto jevu?
- (str. 20) Jak agregace halogenalkanů na povrchu aerosolů ovlivní jejich fotochemické reakce? Za jakých podmínek by tyto reakce byly opravdu environmentálně relevantní?
- (Tabulka 2.3) Proč jsou hodnoty interakcí s ledem více záporné pro bromované methany?
- Z jakého důvodu nedochází k agregaci malých organických látek na povrchu ledových částic při 100 K? Nenašel jsem odpovídající diskusi.
- (Kapitola 3)  $pK_a$  palmitové kyseliny je 4.8, což znamená, že jedinou acidobazickou formou ve vodě musí být konjugovaná báze. Z popisu výzkumu vyplývá, že byla studována pouze protonovaná forma (kyselina) a výpočet se zabýval dokonce i hydratací této formy karboxylové funkční skupiny. Mohla by se doktorandka vyjádřit k tomuto bodu?

Přes výhrady uvedené v posudku konstatuji, že je disertační práce zpracována velmi kvalitně, přehledně, svědčí o zaujetí autorky a o její odborné úrovni a schopnosti samostatně a úspěšně řešit vědecké problémy. Přínos práce očividně přesahuje základní výzkum a dá se předpokládat, že by výsledky mohly být užitečné i pro environmentální aplikace.

Disertační práce **splňuje** všechna kritéria, která jsou na takovou práci kladeny, a **doporučuji** ji k přijetí k obhajobě.

Prof. RNDr. Petr Klán, Ph.D.

23. 8. 2015

Ústav chemie, Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Kamenice 5/A8, 625 00 Brno  
Tel: +420-54949-4856; Fax: +420-54949-2443; E-mail: [klan@sci.muni.cz](mailto:klan@sci.muni.cz)

