Oponentský posudek diplomové práce pana Marka Vetešky „Molekulární simulace ve strukturní analýze interkalátů".

Znalost struktury látky umožňuje vysvětlit její vlastnosti nebo na základě podobnosti její struktury se známou strukturou jiné látky vlastnosti předpovídat. To umožňuje cílenou syntézu látky s požadovanými vlastnostmi. V případě interkalátů v nichž jsou v mezivrství zabudovány organické molekuly je určení struktury velmi obtížné, protože se nedaří připravit monokrystaly takovýchto interkalátů. Proto je nutné vycházet z rtg. difrakčních dat získaných na polykrystalickém materiálu. Difraktogramy interkalátu jsou přitom silně ovlivněny nejen přednostní orientací vrstevnatých krystalku, ale i vlastní neuspořádaností struktury jako jsou např. vzájemné posuny a pootočení vrstev hostitele vůči sobě, tvorba domén a mikropnutí. Z těchto duvodu se jako velmi perspektivní metoda k pochopení struktury interkalátů jeví modelování struktury za pomocí molekulární simulace.

V teoretické části diplomové práce jsou stručně popsány podvojné vrstevnaté hydroxidy odvozené od hydrotalcitu a jejich interkaláty. Obšírněji je zpracována teorie rtg. difrakce a metody molekulárního modelování. V úvodní části jsou také jasně vytyčeny cíle práce. V praktické části diplomant popisuje zpusob konstrukce počátečních modelů, které byly dále optimalizovány. Je třeba pochválit názorné ilustrace, které pomáhají porozumět dosti komplikovaným strukturám výchozích modelu. Diplomant musel přeprogramovat na MFF vyvinutý program SUPRAMOL pro nového hostitele, kterým je v případě jeho práce byl syntetický hydrotalcit zinečnato-hlinitý. Diplomant se soustředil na modelování struktury interkalátu Zn-Al-hydrotalcitu interkalovaného aniony pyrentetrasulfonové kyseliny. Tento interkalát obsahuje v závislosti na vzdušné vlhkosti různé množství ko-interkalované vody. Pro tři různé fáze, u nichž byl změřen difraktogram a stanoven obsah vody, sestavil diplomant inicializační modely a provedl molekulární simulaci s použitím programu CERIUS^2. Výsledky jsou přehledně shrnuty v tabulkách a diskutovány. Diplomant došel k závěru, že vzhledem k malým rozdílům v energiích u jednotlivých modelů je pro dané fáze obtížné určit, který model nejlépe vyhovuje a je pravděpodobné, že se ve struktuře mohou vyskytovat domény tvořené mírně odlišným uspořádáním částic hosta v mezivrství.

Diplomová práce je napsána prakticky bez překlepů a nemám k ní žádné výhrady, pouze formální připomínky:

- na str. 9 a 61 by mělo být $VOPO_4$ místo použitého VOPO.

- na str 75 je trochu nešťastná formulace … jako pevné jednotky označit pouze atomy SO_3 …

Konstatuji, že předložená diplomová práce svým rozsahem, obsahem a kvalitou zpracování splňuje podmínky kladené na diplomové práce a doporučuji ji k obhajobě. Diplomovou práci hodnotím známkou

v ý b o r n ě

Pardubice, 9. 5. 2006

Doc. Ing. Ludvík Beneš, CSc.
Společná laboratoř chemie pevných látek
ÚMCh AV ČR a Univerzity Pardubice
Studentská 84
532 10 Pardubice