

Posudok na dizertačnú prácu: **Modelling of Carbon Nanomaterials and Their Interactions**

Doktorand: Mgr. Michal Langer

Dizertačná práca Mgr. Michala Langer je na výbornej formálnej, grafickej a jazykovej úrovni. Je napísaná v anglickom jazyku, v celkovom rozsahu 104 strán. Ako prílohu obsahuje prehľadový článok publikovaný v Applied Materials Today, kde je doktorand prvým autorom.

Práca je logicky členená na 7 hlavných kapitol. V prvej kapitole autor jasne a stručne uvádza čitateľa do vysoko aktuálnej problematiky uhlíkových bodiek. Aj keď sa tu vynoria viaceré otázky, príloha vhodne dopĺňa potrebné informácie a súvislosti. Podobne jasná je časť venovaná metódam počítačovej chémie, vzhľadom na šírku záberu práce je tu a v priloženom článku spomenutý takmer celý aparát teoretickej chémie. Pre oponenta práce bola prínosom diskusia venovaná molekulovej dynamike a porovnanie rôznych typov termostátov. Metodologicky by bolo zaujímavé doplniť aj rôzne teoretické postupy/stratégie používané pri identifikácii fotoluminiscenčných procesov. Veľmi oceňujem opis metód explicitného zahrnutia rozpúšťadla/okolia do výpočtu vertikálnych excitačných energií.

Následovné kapitoly sú gradujúcim príbehom: autor prv testuje dynamické metódy popisujúce modely uhlíkových bodiek v dvoch rôznych prostrediach. Následne sa venuje konformačnej dynamike diméru molekulového fluoroforu IPCA. Pri bežných teplotách bola zistená rotačná voľnosť stohovaných dimérov, pričom niektoré konformácie môžu viesť k nežiarivej deaktivácii excitovaného stavu. Ďalším krokom je skúmanie dynamiky hybridného systému obsahujúceho PAH, niekoľko molekúl IPCA a vodu. Vplyv prostredia na excitačné a emisné energie je zahrnutý viacerými sofistikovanými spôsobmi, pričom dôležitým výstupom sú excitačno-emisné mapy dobre súhlasiace s experimentom. Veľmi vhodným završením celej práce je spoločná teoreticko-experimentálna štúdia, kde sa autor podieľal na vysvetlení fungovania fluorescenčného turn-on senzora primárnych alkoholov. Sú tu využité metodológie z predchádzajúcich častí, autor však musel ísť ešte o krok ďalej a k modelu molekulového fluorofora pridať ďalšie vnútorné vrstvy. Táto záverečná bodka ukazuje na komplexnosť skúmanej problematiky a zároveň potvrdzuje získanú vedeckú erudíciu doktoranda, ktorý si osvojil veľké množstvo počítačových nástrojov, od molekulovej dynamiky v základnom stave cez vysoko presné výpočty interakčných energií, k excitačným energiám a rôznym modelom solvácie.

K práci mám nasledovné otázky:

1. Z pohľadu teoretickej chémie, aké nutné a postačujúce podmienky skúmate pri identifikácii daného systému ako zdroja fluorescencie?
2. Aký je rozdiel medzi správaním sa CD v N,N-dimetylformamide a vo vode?



3. Čo je dôvodom pre kolaps excitovaného a základného stavu viacerých dimérov IPCA v plynnej fáze?
4. V kapitole 7 uvádzate nielen vertikálne excitačné, ale aj emisné energie. Vzhľadom na použitú metodológiu (MD GS a potom SP výpočet VEE) nie je úplne jasné, ako sa získali emisné energie. Popíšte prosím tento postup.
5. Podľa Tab. 9 je kvalita MM potenciálu výborná pre všetky usporiadania okrem diméru stabilizovaného vodíkovou väzbou. Výsledky MD ukazujú rýchle formovanie stohovaných multimérov IPCA. Nakoľko je toto pozorovanie ovplyvnené voľbou MM?
6. Metodológia zahŕňajúca malý počet MF v QM vrstve a prostredie sa zdá byť výborne otestovaná. Okrem MF však CD obsahujú aj polyaromatické časti a výsledná luminiscencia môže byť výsledkom komplexných procesov, ako opisujete v poslednej kapitole. Aké sú možnosti kontroly presnosti pri súčasnom zväčšovaní systému?

Konštatujem, že práca Mgr. Michala Langeru naplnila zadané ciele a spĺňa nielen formálne, ale hlavne odborné kritéria kladené na dizertačné práce v odbore chémia. Na základe posudzovanej práce navrhujem menovanému udeliť akademický titul „**philosophiae doctor (PhD.)**“.

V Banskej Bystrici, 29.8.2022

doc. RNDr. Šimon Budzák, PhD.



+421 48 446 7348



simon.budzak@umb.sk



Tajovského 40
974 01 Banská Bystrica

Posudok na dizertačnú prácu: **Modelling of Carbon Nanomaterials and Their Interactions**

Doktorand: Mgr. Michal Langer

Dizertačná práca Mgr. Michala Langer je na výbornej formálnej, grafickej a jazykovej úrovni. Je napísaná v anglickom jazyku, v celkovom rozsahu 104 strán. Ako prílohu obsahuje prehľadový článok publikovaný v Applied Materials Today, kde je doktorand prvým autorom.

Práca je logicky členená na 7 hlavných kapitol. V prvej kapitole autor jasne a stručne uvádza čitateľa do vysoko aktuálnej problematiky uhlíkových bodiek. Aj keď sa tu vynoria viaceré otázky, príloha vhodne dopĺňa potrebné informácie a súvislosti. Podobne jasná je časť venovaná metódam počítačovej chémie, vzhľadom na šírku záberu práce je tu a v priloženom článku spomenutý takmer celý aparát teoretickej chémie. Pre oponenta práce bola prínosom diskusia venovaná molekulovej dynamike a porovnanie rôznych typov termostátov. Metodologicky by bolo zaujímavé doplniť aj rôzne teoretické postupy/stratégie používané pri identifikácii fotoluminiscenčných procesov. Veľmi oceňujem opis metód explicitného zahrnutia rozpúšťadla/okolia do výpočtu vertikálnych excitačných energií.

Následovné kapitoly sú gradujúcim príbehom: autor prv testuje dynamické metódy popisujúce modely uhlíkových bodiek v dvoch rôznych prostrediach. Následne sa venuje konformačnej dynamike diméru molekulového fluoroformu IPCA. Pri bežných teplotách bola zistená rotačná voľnosť stohovaných dimérov, pričom niektoré konformácie môžu viesť k nežiarivej deaktivácii excitovaného stavu. Ďalším krokom je skúmanie dynamiky hybridného systému obsahujúceho PAH, niekoľko molekúl IPCA a vodu. Vplyv prostredia na excitačné a emisné energie je zahrnutý viacerými sofistikovanými spôsobmi, pričom dôležitým výstupom sú excitačno-emisné mapy dobre súhlasiace s experimentom. Veľmi vhodným záverom celej práce je spoločná teoreticko-experimentálna štúdia, kde sa autor podieľal na vysvetlení fungovania fluorescenčného turn-on senzora primárnych alkoholov. Sú tu využité metodológie z predchádzajúcich častí, autor však musel ísť ešte o krok ďalej a k modelu molekulového fluoroformu pridať ďalšie vnútorné vrstvy. Táto záverečná bodka ukazuje na komplexnosť skúmanej problematiky a zároveň potvrdzuje získanú vedeckú erudíciu doktoranda, ktorý si osvojil veľké množstvo počítačových nástrojov, od molekulovej dynamiky v základnom stave cez vysoko presné výpočty interakčných energií, k excitačným energiám a rôznym modelom solvácie.

K práci mám nasledovné otázky:

1. Z pohľadu teoretickej chémie, aké nutné a postačujúce podmienky skúmate pri identifikácii daného systému ako zdroja fluorescencie?
2. Aký je rozdiel medzi správaním sa CD v N,N-dimetylformamide a vo vode?



3. Čo je dôvodom pre kolaps excitovaného a základného stavu viacerých dimérov IPCA v plynnej fáze?
4. V kapitole 7 uvádzate nielen vertikálne excitačné, ale aj emisné energie. Vzhľadom na použitú metodológiu (MD GS a potom SP výpočet VEE) nie je úplne jasné, ako sa získali emisné energie. Popíšte prosím tento postup.
5. Podľa Tab. 9 je kvalita MM potenciálu výborná pre všetky usporiadania okrem diméru stabilizovaného vodíkovou väzbou. Výsledky MD ukazujú rýchle formovanie stohovaných multimérov IPCA. Nakoľko je toto pozorovanie ovplyvnené voľbou MM?
6. Metodológia zahŕňajúca malý počet MF v QM vrstve a prostredie sa zdá byť výborne otestovaná. Okrem MF však CD obsahujú aj polyaromatické časti a výsledná luminiscencia môže byť výsledkom komplexných procesov, ako opisujete v poslednej kapitole. Aké sú možnosti kontroly presnosti pri súčasnom zväčšovaní systému?

Konštatujem, že práca Mgr. Michala Langeru naplnila zadané ciele a splňa nielen formálne, ale hlavne odborné kritéria kladené na dizertačné práce v odbore chémia. Na základe posudzovanej práce navrhujem menovanému udeliť akademický titul „**philosophiae doctor (PhD.)**“.

V Banskej Bystrici, 29.8.2022

doc. RNDr. Šimon Budzák, PhD.



+421 48 446 7348



simon.budzak@umb.sk



Tajovského 40
974 01 Banská Bystrica