

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: **Martina Valášková**
Název práce: Analýza vibračních spekter vybraných environmentálních kontaminantů
Studijní program a obor: Fyzika (B0533A110001), Fyzika
Rok odevzdání: 2022

Jméno a tituly vedoucího: **RNDr. Václav Profant, Ph.D.**
Pracoviště: Fyzikální ústav UK, MFF UK
Kontaktní e-mail: profant@karlov.mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího:

Předkládaná bakalářská práce Martiny Valáškové se věnuje podrobné charakterizaci dvou molekul – melaminu a thiramu – pomocí Ramanovy spektroskopie a mikrospektroskopie v kombinaci s kvantově mechanickými spektrálními simulacemi. Obě tyto molekuly byly široce využívány v zemědělství a potravinářském i dalších průmyslových odvětvích, avšak z dnešního pohledu se jedná o významné environmentální kontaminanty s řadou negativních vlivů na životní prostředí i zdraví člověka.

Studentka se nejprve v souladu se zadáním bakalářské práce seznámila s teoretickými principy vibrační spektroskopie a Ramanova rozptylu a vypracovala jejich stručnou rešerši. Osvojila si způsob přípravy vzorků, prakticky zvládla měření na Ramanovském spektrometru a mikrospektrometru a naučila se základy kvantově chemických výpočtů pro simulace molekulových spekter. Na základě těchto znalostí a dovedností se jí pak podařilo získat značné množství původních výsledků, mezi něž patří především: (i) charakterizace práškových polykrystalických vzorků obou látek a rozlišení různých polymorfů prostřednictvím analýzy Ramanovských map, (ii) stanovení ideálních rozpouštědel pro obě molekuly a získání kvalitních spekter melaminu a thiramu v roztoku, (iii) verifikace a rozšíření předchozích měření metodou kapkově nanášených povlaků (DCDR), (iv) v rámci kvantově chemické výpočetní studie stanovení vlivu flexibility, interakce s rozpouštědlem a aglomeračních efektů na kvalitu simulovaných Ramanových spekter a (v) pro obě molekuly detailní interpretace vibračních pásů a jejich přiřazení jednotlivým vibračním pohybům.

Martina Valášková během řešení bakalářské práce prokazovala velký zájem o studovanou problematiku, pracovala svědomitě a s velkým nasazením. Během přípravy vzorků, provádění a vyhodnocování měření i výpočetních simulací prokázala vysokou míru důslednosti a spolehlivosti. Kriticky hodnotila vlastní závěry a posuzovala jejich soulad s odbornou literaturou. Rád bych vyzdvihl i samotnou formální stránku práce, která je i přes značný rozsah konzistentní, přehledná a s pěknou grafickou úpravou.

Práce Martiny Valáškové splňuje a v mnoha ohledech i převyšuje požadavky kladené na bakalářskou práci, obsahuje kvalitní a kvalitně prezentovaný výzkum, který má potenciál pro publikaci v impaktovaném časopise, a mohu ji proto doporučit k obhajobě. Navrhuji hodnocení stupněm výborně a myslím, že by si zasloužila i navržení na cenu děkana.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Nemám žádné otázky ani připomínky.

Práci

- doporučuji
 nedoporučuji
uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

- výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího:

V Praze 24. 8. 2022