Univerzita Karlova
Přírodovědecká fakulta
Ústav geochemie, mineralogie a nerostných zdrojů
Albertov 6 128 43 Praha 2

Mgr. Adam Culka, Ph.D.
E-mail: culka@natur.cuni.cz; Tel: +420221951517

UNIVERZITA KARLOVA
Přírodovědecká fakulta

V Praze dne 14. 8. 2024

Oponentský posudek bakalářské práce Jana Mráčka:

Sledování teplotně indukovaných změn v minerálech a dalších fázích pomocí Ramanovy spektroskopie

Autor v předložené bakalářské práci představuje ucelený systém pro sledování teplotně indukovaných fázových přechodů v minerálech/fázích postavený na ručním Ramanovském spektrometru RaPort 532 nm doplněným o na míru vyrobeným optickým prvkem s využitím 3D tisku pro získávání Ramanovských spekter na vzdálenost cca 25 cm. Nedílnou součástí je zahřívací aparatura skládající se z keramického odlitku, odporové spirály a termoelektrického článku pro měření teploty a zdroje s jemnou regulací napětí.

Autor v této experimentálně zaměřené práci nejprve uvede do problematiky fázových přechodů v minerálech/fázích a krátce představí tradiční metody používané pro sledování fázových přechodů v laboratoři (TGA, DTA, DSC, a prášková rentgenová difrakce). Následuje sekce o Ramanovské spektroskopii a její využití pro sledování fázových změn. Následuje samotný popis konstrukce a kalibrace systému pro termální Ramanovské analýzy. Funkčnost a reálná aplikovatelnost/využitelnost je demonstrována na monitorování fázových změn (pokud se v teplotním rozsahu nacházejí) na následujících minerálech/fázích: karbid křemíku, dusičnan draselný a syntetických hydratovaných síranech epsomit, alunogen, čermíkit, alum-(K) v maximálním rozmezí teplot laboratorní až cca 460 °C. V diskuzi autor zdárně konfrontuje svoje výsledky s relevantními daty obdobných experimentů z literatury.

Předložená práce svým zpracováním, vědeckou úrovní a především prezentací výsledků autorem navrženého systému převyšuje požadavky na bakalářskou práci. Obrazová dokumentace, schémata, prezentace experimentálních dat, především formou Ramanovských spekter a práce s literaturou je na vysoké úrovni. Přínos systému představujícího relativně levné a jednoduché řešení pro sledování *in situ* termálních fázových změn s využitím ručního Ramanova spektrometru je zřejmý například pro monitoring změn minerálů hořících hald, atd.

Bakalářskou práci hodnotím jako výbornou, s minimem chyb a nedostatků a mám několik dotazů do diskuse (viz níže).

Jazyková stránka:

- Práce je na vysoké jazykové úrovni (zcela ojedinělé gramatické chyby např. S30Ř6; Hyperkorektní chyby českého jazyka „při čemž" má být přičemž S9Ř17), nastupující lehká jazyková únava je patrná ve spektroskopických pasážích diskuse
- Autor využívá cizí termíny, kde by možná vhodněji v českém textu působil běžně používané české slovo

Formátování a překlepy:

- Oceňuji práci s indexy u funkčních skupin, zvláště pak s indexy nad sebou, ale několik nezformátovaných se přece jen najde
- Faktický překlep stránka 29, čtvrtý řádek odspodu „dochází k posunu pásu ν_1 na pozici 992 cm^{-1}" má být na pozici 982 cm^{-1}

Obsahové nedostatky či chyby:

- V celé práci není implicitně zmíněna a nastíněna fluorescence, velmi důležitý negativní jev v Ramanovské spektroskopii. Následující text: „Ramanův jev je obecně velmi slabý, pokud má vzorek po ozáření **vysoké pozadí**, může být získání kvalitních spekter obtížné až nemožné." Zde se znalý čtenář dovtípí, že je nejspíše míněna fluorescence, nicméně v práci by problematice fluorescence (vznik, a metody jak ji minimalizovat) mělo být věnováno podstatně více prostoru, neboť v aplikacích RS v mineralogii a příbuzných oborech se jedná o důležité téma a jednu z limitací RS.
- S problematikou pozadí souvisí také velmi výrazné „vlnění" pozadí u řady spekter, které není vysvětleno
- Lehká korekce: Obrázek 8(a): ukazuje schematické zobrazení rozostření laserového svazku, nicméně na vzdálenost 25 cm je reálná stopa laseru velikosti max. cca 2-4 cm, srovnatelná s velikostí nosiče vzorku

Doporučení a otázky k diskusi:

- Přidat vzorce k názvům fází v diskuzi pro lepší orientaci čtenáře
- Jak by autor okomentoval, pokusil se vysvětlit „vlnění" pozadí v některých spektrech, má původ ve vzorku, nebo se jedná o instrumentální artefakt (pravidelnost vln) či jiné vysvětlení

.....

Mgr. Adam Culka, Ph.D.