

## Posudek diplomové práce

Bc. Petr Kubelík: *Časově rozlišená Fourierova spektroskopie krátce žijících částic*

Diplomová práce je vedena jako přípravný krok pro identifikaci aniontu  $\text{CN}^-$  v infračerveném oboru spektra. V důsledku vysoké shody spektrálních vlastností aniontu s vlastnostmi jeho přirozeného souputníka v případech vhodných prekurzorů, tj. radikálu  $\text{CN}$ , jde o úlohu vysoce obtížnou. Hledání zákonitě velice slabých spektrálních přechodů aniontu v bohatém a strukturně složitém spektru radikálu je velice blízké pověstnému hledání jehly v kupce sena. Přesvědčivá identifikace  $\text{CN}^-$  je jen těžko myslitelná bez přiřazení prakticky všech, tedy i těch nejslabších spektrálních přechodů neutrálního radikálu. Přesnost měření odpovídajících frekvencí prudce klesá s jejich intenzitami a je tak silně limitujícím faktorem identifikačního procesu na čistě frekvenční bázi. Jedno z možných řešení tohoto problému je rozšíření frekvenčního studia o studium koncentrační v adekvátní časové škále s adekvátním časovým rozlišením.

Autor diplomové práce jde zmíněnou cestou a jeho volbu tak považuji za vhodnou a logickou. Za jako velmi vhodnou lze rovněž považovat volbu dikyanu jako prekurzoru pro syntézu  $\text{CN}^-$  v elektrické výboji ve směsi s heliem. Aktuální monitorování také prokázalo vhodnost použití metody časově rozlišené infračervené FT spektroskopie se synchronizovaným skenováním.

Zásadním výsledkem práce je detailní spektroskopická charakteristika 7 ro-vibronických pásů radikálu  $^{12}\text{C}^{14}\text{N}$ , rozšiřující stávající literární znalost o charakteristiky stavů  $\text{A}^2\Pi_{v=5}$  a 6. Jako cenný "by-product" práce také

přináší realistické odhady dob života celé řady energetických stavů nejenom CN, ale i helia, uhlíku a dusíku pro dané experimentální podmínky. Výsledky vytváří ucelenou studii, což je nakonec silně doloženo jejich publikováním v Journal of Molecular Spectroscopy, a zároveň slibné východisko pro pokračování v identifikačním úsilí.

Prezentované výsledky zřetelně prokazují kompetentnost autora řešit zadaný vědecký problém a více než dostatečně vyhovují parametrům požadovaným od diplomové práce. Pokud je součástí posudku i kvantitativní hodnocení, potom práci klasifikuji jako *výbornou*.

Jako jedinou za zmínku stojící "nedostatečnost" práce shledávám až příliš lakonickou diskusi časového chování měřených excitačních teplot uzavřenou výrokem "Tento jev se nepodařilo zcela uspokojivě objasnit" (strana 43). Podle mého názoru jde o velice zajímavý problém a jeho rozbor bych jako čtenář s velkým zájmem uvítal. Tato nedostatečnost je snadno napravitelná diskusí v procesu obhajoby a určitě mne nevede k jakémukoliv pochybování o výborné úrovni oponované práce.

1.9.2008 Praha

Vladimír Špirko

Ústav organické chemie a biochemie, v.v.i

Centrum biomolekul a komplexních molekulových systémů

Akademie věd České republiky

Flemingovo nám. 2, 166 10 Praha 6