

# Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě  
Univerzity Karlovy

- posudek vedoucího  posudek oponenta  
 bakalářské práce  diplomové práce

Autor/ka: Bc. Matúš Hodoš

Název práce: Raman spectroscopic study of biogenic crystals of sulphate and phosphate complexes with alkaline earth metals present in microorganisms

Studijní program: Biofyzika a chemická fyzika

Studijní obor: Experimentální biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2024

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: doc. RNDr. Ivana Šloufová, Ph.D.

Pracoviště: Katedra makromolekulární a fyzikální chemie, PřF UK

Kontaktní e-mail: ivana.sloufova@natur.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/oponenta:**

Diplomová práce má standardní délku (76 stran bez citací) je psána velmi dobrou angličtinou bez gramatických a typografických chyb. Teoretický úvod obsahuje shrnutí krystalografických vlastností krystalů barytu ( $\text{BaSO}_4$ ) a celestinu ( $\text{SrSO}_4$ ), velice podrobný a pěkně zpracovaný text zaměřený na vysvětlení koloběhu barnatých a strontnatých iontů v mořské vodě doplněný řadou citací. Dále obsahuje stručný úvod do Ramanovy spektroskopie a transmisní elektronové mikroskopie. Následuje experimentální část (popis Ramanského mikroskopu, seznam chemikálií, postup přípravy zásobních roztoků, agarových vzorků s a bez DNA, přípravu řas). Následuje oddělená kapitola výsledků a diskuze. Práce je zakončena shrnujícím závěrem.

K obsahu vlastní práce bych měla několik připomínek, které však nijak nesnižují úroveň předkládané práce:

1. V práci je použito (i v rámci jedné tabulky – např. str. 32, popis obrázku na str. 58) dvojitý způsob zápisu chemických sloučenin – vedle tradičních zápisů  $\text{MgSO}_4$ ,  $\text{Na}_2\text{MoO}_4$  atd. je používán i zápis abecední  $\text{HNa}_2\text{O}_4\text{P}$ , což není nejvhodnější volba, navíc pro zápis vzorců fosforečnanů v obrázcích (např. v obr. 31) je zvolena opět tradiční notace. Některé chemické vzorce sloučenin jsou zcela chybné -  $\text{BaPO}_4$  a  $\text{SrPO}_4$  pro fosforečnan barnatý a strontnatý (str. 49,70 a jinde),  $\text{NaSO}_4$  (str. 73),  $\text{Na}^2\text{SO}^4$  (horní indexy, namísto dolních – str. 73) pro síran sodný,  $\text{BaP}_3\text{O}_{10}$  (str 58) pro trifosforečnan barnatý (správně  $\text{Ba}_5(\text{P}_3\text{O}_{10})_2$ ). Namísto „Ba ions“ by bylo vhodnější uvádět „ $\text{Ba}^{2+}$  ions“.
2. Vzhledem k tomu, že vlastní práce se zabývá výhradně Ramanovými spektry nerozpustných sloučenin barya a stroncia (síranů, fluoridu, různých fosforečnanů), ocenila bych uvedení vlastního přiřazení pozorovaných pásů jednotlivých krystalů dle literatury. Autor by se poté mohl vyhnout obrátům „dublet v oblasti“ atd. namísto označení konkrétní vibrace.
3. Poloha symetrické valenční vibrace aniontů je v práci používána coby spektrální marker pro poměr příslušných barnatých a strontnatých solí ve vzorku. Je škoda, že ani jednou nebyl učiněn pokus o sestavení „kalibrační křivky“ závislosti polohy maxima na poměru iontů.
4. Velká část výsledků se týká nerozpustných fosforečnanů barya a stroncia. Co jsem velmi postrádala, bylo uvedení a v rámci diskuze zauvažování hodnot rozpustností jednotlivých sloučenin. Autor by se tak mohl vyhnout obecným termínům např. na str. 72 „sulphate has a higher affinity for barium than phosphate“.
5. Většina spekter ve výsledkové části je evidentně uvedena normalizována na maximální pás ve spektru. Toto však v popiscích (ani jinde v práci) uvedeno není. Navíc, v některých případech normalizace „smazává“ informace týkající se kvantity. Také není uvedeno, jak byla spektra lišící se relativními intenzitami jednotlivých pásů získána (obr. 34-37, 39-42) – z různých bodů v rámci jednoho krystalu, nebo z různých krystalů?

V souhrnu lze říci, že diplomant provedl skutečně velké množství experimentální práce jak při přípravě vzorků, tak při jejich měření. Dosáhl tak řady originálních výsledků. Velké množství experimentálních dat i fakt, že v rámci práce byly dosaženy i neočekávané výsledky, které bylo nutné opakovaně ověřovat, zřejmě vedlo k tomu, že v některých případech byl upřednostněn kvalitativní popis dat nad kvantitativním. Vzhledem k tomu, že jediné závažnější nedostatky práce se týkají chemického názvosloví, ale práce je vypracována na fyzikálním, nikoli chemickém, ústavu, hodnotím práci stupněm výborně.

### **Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:**

1. Byl učiněn pokus o z-scany a určení tloušťky vrstev fosforečnanů na  $\text{BaF}_2$ ?

2. Velmi mě zaujalo, že při studiu tvorby krystalů přímo uvnitř řas, signál výhradně pocházel z BaSO<sub>4</sub>, ačkoli k buňkám byl přidán roztok SrCl<sub>2</sub> o čistotě 99.99%. Bylo by možné, na základě možné předpokládané stopové koncentrace Ba<sup>2+</sup> iontů v roztoku SrCl<sub>2</sub>, známé hustoty barytu a koncentrace buněk v roztoku, spočítat, jaké množství (objem) krystalů barytu může být řasami vytvořeno?
3. Na obr. 31 je pozorován velký posun pásu trifosfátu pro poměr iontů Ba<sup>2+</sup>: Sr<sup>2+</sup> 1:9 oproti 1:8. Ve vysvětlení na str. 71 je konstatováno, že pás pro poměr 1:9 je asymetrický a rozkladem pásů by byl získán jeden pás pokračující v trendu nižších poměrů a druhý odpovídající poloze Sr<sub>5</sub>(P<sub>3</sub>O<sub>10</sub>)<sub>2</sub>. Ve spektru je však nízko-vlnočtové rameno pásu intenzivnější pro čistý Sr<sub>5</sub>(P<sub>3</sub>O<sub>10</sub>)<sub>2</sub> oproti poměru Ba<sup>2+</sup>: Sr<sup>2+</sup> 1:9. Je možné uvedené vysvětlení podložit provedením navržené konvoluce pásu? Není možné, že jsou pozorovány dva různé polymorfy?

### Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

### Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně  velmi dobře  dobře  neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 14.8.2024

Ivana Šloufová