



Doc. RNDr. Marek Procházka, Dr.

Fyzikální ústav

MFF UK

Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

tel: 221 911 474

fax: 224 922 797

e-mail: prochaz@karlov.mff.cuni.cz

Oponentský posudek diplomové práce Dušana Spáčila

„Povrchem-zesílený rezonanční Ramanův rozptyl Zn(II) porfyrinů v systémech s agregovanými a neagregovanými Ag nanočásticemi“

Předkládaná diplomová práce se zabývá SERRS spektroskopii testovacího chromoforu (zinkového porfyrinu ZnTMPyP) adsorbovaného na stříbrné koloidní nanočástice. Byly porovnávány systémy s izolovanými nanočásticemi a kompaktními agregáty nanočástic vytvořených přidávkem NaCl. SERRS spektra a jejich časové vývoje (v časové škále 0-680 s) byly měřeny v širokém rozmezí koncentrací ZnTMPyPu (od 5×10^{-3} M až po mez detekce) a při dvou excitačních vlnových délkách (441.6 a 532 nm). Pro přesnou identifikaci a kvantifikaci intenzitních a spektrálních změn v časových vývoji byla použita metoda faktorové analýzy. Získané výsledky byly porovnány s morfologiemi systémů získaných pomocí metod absorpční spektroskopie elektronové mikroskopie. Fakt, že testovací SERS studie na nechromoforových adsorbátech nebyly úspěšné, nepovažuji za vážný problém, protože to nebylo hlavní náplní práce.

Celkově na mě práce působí dojmem, jako by byla dokončována ve spěchu a některé věci nejsou dotaženy do konce. V práci je hodně překlepů a nepřesností. Především v úvodu je znát, že se diplomat úplně neorientuje v citované literatuře (některé nové přehledové články či knihy nejsou citovány; některá fakta nejsou citována správně; některá obecně známá fakta jsou citována, zatímco jiná, která to vyžadují, nejsou citována vůbec; citace 4-6 jsem v textu vůbec nenašel; citace 45 a 47 je totožná). Graficky práce vypadá pěkně, ačkoliv někdy se text míchá s obrázky, některá spektra nebo křivky nejsou dostatečně rozlišitelné, občas nějaká křivka chybí, apod. Co se týká výsledků, na práci oceňuji především velké množství časově náročných experimentů, které musel diplomant provést a je jen škoda, že interpretace tak zajímavých výsledků není dotažena. Domnívám se, že možnosti faktorové analýzy nebyly v práci plně využity. Závěry typu „nárůst intenzity po přidávku NaCl“ nebo naopak „pokles intenzity v čase pro vysoké koncentrace“ jsou v SERS spektroskopii dlouho známy a bylo by možné k nim dojít i bez použití faktorové analýzy. Naopak spektrální změny v časových vývoji spekter reprezentované druhým, resp. třetím subspektrém faktorové analýzy jsou velmi zajímavé, ale v práci nejsou podrobněji popsány a diskutovány.

K práci mám následující dotazy:

1. Jak je definována a jak byla určována mez spektrální detekce? Spektra mezní detekce na str. 36-38 nejsou zobrazena detailně, ale i tak se mi zdá, že meze spektrální detekce jsou nižší, než určené. Navíc je v práci uvedeno, že mez spektrální detekce určená z dynamických měření je o řád nižší než mez určená ze stacionárních měření, k čemuž nevidím důvod.
2. Jak byla intenzitně normována SERRS spektra? Na str. 41 je uvedeno, že před faktorovou analýzou byla spektra normalizována na vnitřní standard, ale nikde v práci není zmínka na jaký.
3. Bylo uvažováno o možném příspěvku rezonančního Ramanova rozptylu v SERRS spektrech ZnTMPyP pro koncentrace vyšší než cca 5×10^{-4} M? Určené meze detekce v rezonančních Ramanových spektrech ZnTMPyP jsou 5×10^{-4} , resp. 5×10^{-5} M, ale SERRS spektra byla měřena i z koncentrací vyšších.
4. Jaký vliv by měla změna pořadí přidávaných látek (NaCl, ZnTMPyP) na časový vývoj SERRS spekter? Pokud má NaCl definovaným způsobem měnit morfologii koloidních nanočástic, byl by logičtější postup nejdříve přidávat NaCl a pak ZnTMPyP .

Závěrem konstatuji, že práce splňuje požadavky kladené na diplomovou práci a doporučuji přijetí práce k obhajobě. Navrhuji klasifikaci stupněm výborně za předpokladu perfektní prezentace práce a zodpovězení mých dotazů při obhajobě.

V Praze dne 20.5.2011

Doc. RNDr. Marek Procházka, Dr.