

## Oponentský posudek

Bakalář: **Jaroslav Smitka**

Studijní obor: Chemie životního prostředí

Název práce: **Optimalizace separace a kvantifikace předpokládaných produktů velkého třesku**

Předkládaná bakalářská práce Jaroslava Smitky je zaměřena na analýzu předpokládaných produktů simulace velkého třesku za laboratorních podmínek. V teoretické části je vysvětlena teorie velkého třesku, jsou zde popsány sloučeniny studované v této práci a vybrané metody analýzy – plynová a vysokoúčinná kapalinová chromatografie. V experimentální části je využito GC MS a HPLC UV metod k analýzám formamidu, 2-methyl-1-butanolu, 3-methoxy-1-propanolu, 2-amino-1-butanolu a dále laserem ostřelovaného 3-methoxy-1-propanolu a formamidu. Pro dvě testované látky (3-methoxy-1-propanol a 2-methyl-1-butanol) jsou určeny meze detekce a stanovitelnosti pomocí plynové chromatografie.

Celkově je práce sepsána přehledně, je vhodně členěna do kapitol a obsahuje minimum překlepů.

K práci bych měla následující připomínky a dotazy:

- 1) V kapitole 2.3 popisujete vznik plazmatu. V této kapitole ale není uveden žádný odkaz na použitou literaturu. Z jakého zdroje jste čerpal informace?
- 2) V kapitole 2.7.2 jsou citovány spíše starší práce, takže uvedené informace nejsou již zcela aktuální.
- 3) Definice retenčního času na straně 22 není úplně správná. Píšete, že je to doba, za kterou projde analyt kolonou. Jak zní správná definice retenčního času?
- 4) Od jakého výrobce/výrobců byly použité HPLC kolony?
- 5) Co znamená přetížený pík (kapitola 4.1.1 Analýza 2-amino-1-butanolu)?
- 6) Porovnával jste též hmotové spektrum 2-amino-1-butanolu s databází? Pokud ano, jaká byla shoda s databázovým spektrem?
- 7) Zkoušel jste zředit nebo dávkovat menší objem 3-methoxy-1-propanolu a 2-methyl-1-butanolu, abyste nepřekročil kapacitu kolony a získal více symetrický pík? Jaká byla koncentrace těchto látek?
- 8) U kalibračních závislostí (str. 31) uvádíte jednotku plochy a.u., což není správně. Jaká je jednotka plochy píku?

- 9) Hodnota korelačního koeficientu  $R=1$  u kalibračních křivek může být zkrslena kvůli neekvidistantnímu rozložení bodů. Proč byla vybrána tato kalibrační sada?
- 10) Proč jste použil jiné složení mobilní fáze pro analýzu ozařovaného a neozařovaného formamidu než je optimalizované složení pro separaci testovaných látek?
- 11) V kapitole 4.2.2 uvádíte: „Eluční profil formamidu „koeluuje“ se systémovými píky, které znemožňují vhodnou kvantifikaci“. Jakým způsobem jste určoval mrtvý čas kolony v HPLC? Z čeho jste usoudil, že pík formamidu (obr. 13 až 16) eluuje s mrtvým časem kolony? Z obrázků 13 až 16 to není patrné – některé systémové píky eluují před píkem formamidu a ani tento pík není zdeformován.
- 12) U obrázků 13 až 16 jsou špatné popisky na ose y.

Předkládaná práce splňuje nároky kladené na bakalářskou práci. Bakalářskou práci Jaroslava Smitky doporučuji k obhajobě.

V Praze dne 9.6. 2011

Mgr. Květa Kalíková, Ph.D.