

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

posudek oponenta
bakalářské práce

Autor/ka: Denisa Kubániová

Název práce: *Studium hyperjemných interakcí v nanočásticích přítomných v biologických systémech*

Studijní program a obor: Fyzika, Obecná fyzika

Rok odevzdání: 2012

Jméno a tituly oponenta: RNDr Karel Závěta, CSc.

Pracoviště: Fyzikální ústav AV ČR, v. v. i.

Kontaktní e-mail: zaveta@fzu.cz

Odborná úroveň práce:

vynikající

Věcné chyby:

téměř žádné

Výsledky:

originální

Rozsah práce:

veliký

Grafická, jazyková a formální úroveň:

vynikající

Tiskové chyby:

téměř žádné

Celková úroveň práce:

vynikající

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky oponenta:

Práce byla vypracována pod vedením doc. J. Kohouta a byla sepsána v jazyce slovenském. Netroufám si proto vyjadřovat se k lingvistické úrovni předložené práce, ale předpokládám, že i tato její stránka je v pořádku.

Po velmi stručném úvodu (1 stránka), zahrnujícím však přesto i motivaci tohoto směru výzkumu a základní soupis použitých metod, následuje 13 stran zdařile popisujících Mössbauerův jev a hyperjemné interakce. V další části je popsáno použité experimentální i softwarové vybavení. Poslední dvě části, mimo závěr, se postupně zabývají přípravou nanočástic oxidů železa dvěma zásadně odlišnými metodami a studiem těchto nanočástic zejména s použitím Mössbauerovy spektroskopie. Sluší se poznamenat, že části obsahující vlastní experimentální výsledky

s těmito dvěma typy nanočástic zabírají celkem 12, resp. 6 stránek. Seznam použité literatury zahrnuje 34 položek, z nichž 24 bylo publikováno po r. 2000, což svědčí o aktuálnosti studované problematiky.

Hlavní vlastní příspěvek autorky se týká podrobné charakterizace a studia dvou typů systémů nanočástic oxidů Fe – jednak laboratorně připravených v matici SiO₂, jednak produkovaných bakteriemi za definovaných podmínek. Práce tak ve své experimentální části obsahuje obrovské množství dat včetně jejich zpracování a svým rozsahem zřetelně překračuje obvyklý rámec práce bakalářské.

Je chvályhodné, že autorka i při pojednání o teorii Mössbauerova jevu používá dvě nové knihy o Mössbauerově spektroskopii [1,2] a i její střídá volba doprovodných obrázků je zdařilá. Je možno podotknout, aniž by to byla zásadní výtka, že vztah (2.34) na str. 13 bývá psán v poněkud jiném tvaru, kde μ je vyjádřeno jako součin jaderného Bohrova magnetonu a jaderného g-faktoru, ale další popis je fyzikálně naprosto v pořádku

Pro kapitulu 4, kde hlavní pozornost je věnována ϵ fázi Fe₂O₃, jsou zdařilé obrázky 4.17, 4.20 a 4.23 zcela klíčové a názorně shrnují velké množství zpracovaných dat.

Výsledky předchozí kapitoly doplněné o převzatá data ze studia magnetitu tvoří pak rámec pro vyhodnocování spekter (nestechiometrického) magnetitu, produkovaného bakteriemi, jehož studium je náplní kapitoly 5. Účinnost použití vnějšího magnetického pole při snímání Mössbauerova spektra je velmi pěkně ilustrována rozdíly mezi spektry v závěrečných obr. 5.7 a 5.8 na str. 47 a 48.

Závěr práce přes svou stručnost velmi výstižně charakterizuje dosažené výsledky a naznačuje další směr, kterým se bude výzkum na tomto poli ubírat.

Poznámky

Poněkud neobvyklé až zarážející je užívání kursivy při psaní značek prvků - např. mnohokrát se vyskytující ⁵⁷Fe - a všechny chemické vzorce. Neznám slovenskou normu, ale s českou je to v rozporu.

Na správné psaní jména Lorentz (Lorentz s.3, Lorenz s. 6) je třeba si dát pozor, protože existuje nejen Lorentzova křivka, kterou má autorka zde na mysli, ale i úplně jiná Lorenzova křivka a pro dovršení ještě Lorentz-Lorenzův vztah.

Buď v odst. 3.3 nebo při popisu spektra prvního polymorfu na str. 23 by bylo vhodné zopakovat význam jednotlivých parametrů Mössbauerova spektra, jež byly definovány o mnoho stránek dříve.

s. 25, obr. 4.7b – použit termín nasycení pro B=7 T asi není správné, ostatně autoři práce [17], z níž je obázek převzat, mluví o magnetizaci v tomto poli a nikoli o nasycení.

Tzv. core-shell model (str. 27) se nemusí týkat jen MS. Proto by mělo být výslovně uvedeno, kdy začínají předpoklady pro jeho použití právě v MS. V dalším textu je pro povrch či povrchovou vrstvu částice používán termín „shell“ a pro její jádro „core“, jež jsou skloňovány podle slovenské gramatiky, což asi není z jazykového hlediska příliš hezké ani důsledné. Spojení „shell komponenta“ (s. 29), kdy se z podstatného jména stane přídavné položením před jiné podstatné jméno, je sice v americké angličtině hojně užívané, ale v češtině a patrně i ve slovenštině zní značně cizorodě.

Při analýze magnetických měření je uveden obor hodnot remanence vyjádřený pomocí velikosti remanentní magnetizace, o magnetické „tvrdomosti“ sice lépe vypovídá poměr M_R/M_s , ale situace je z uvedených obrázků patrná.

Přehlednutí typu (str. 41) „...sú pri hélíovej teplote sú znázornené na obrázkoch....“ jsou opravdu výjimečná a je možno pochválit pečlivou kontrolu rukopisu.

Při popisu struktury magnetitu (str. 41) je poněkud nepřesný výrok o počtu tetraedrických a oktaedrických poloh v mřížce. Uvedená čísla 8 a 16 se týkají počtu obsazených poloh v základní buňce.

V seznamu literatury je u položky [5] „tisková chyba“: CONFIT: *Mössbauerspe tra fitting program....* (v elektronické verzi práce je na stejném místě chyba, ale pněkud jiná).

Při pokusu o zjištění správného názvu citace [33] (uvedený název *Influence of magnetite stoichiometry of UVI reduction*) jsem zjistil, že správné číslo svazku Environmental Science and Technology v r. 2012 je 46 (a nikoliv 70 jak je uvedeno) a správný název má být *Influence of magnetite stoichiometry on U^{VI} reduction*.

Uvedené poznámky charakterizující některé nedostatky ani v nejmenším nesnižují celkově vysokou úroveň předložené práce.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

Z textu na str. 4 a 5 se zdá vyplývat, že Dopplerova – ss. 4, 6, 16 (nebo raději Dopplerovská? s. 5, několikrát) energie je spojena pouze s tepelným pohybem atomu a tedy i jádra. Jak to je opravdu?

Na straně 12 se píše „například α -Fe používané při kalibrácii mössbauerovského spektra, u kterého je kvadrupólový posun nulový.“ Proč je posun nulový?

V odst. 4.2 (str. 25) se probírá jev superparamagnetismu. Za vztahu (4.2) sice vyplývá, že K_{eff} stoupá se snižující se velikostí částice, ale pro hodnotu relaxačního času je podle (4.1) rozhodující veličinou nikoliv hustota anizotropní energie, ale její celková velikost pro danou částici. Jak tedy závisí τ na průměru částice pro dva limitní případy $K_b \gg K_s$ a $K_b \ll K_s$?

Na str. 43 je zmatečně uvedeno: „Komponenty spektra s izomérnym posunom v rozmedzí 0, 89 – 1,15 mm/s prisudzujeme katiónom Fe^{2+} a v rozmedzí 0,37 – 0,76 mm/s katiónom Fe^{2+} [2].“ Jak to má být správně?

Při použití Mössbauerovy spektroskopie ve vnějším magnetickém poli, vhodném zejména u magnetitu, dochází k charakteristickým změnám efektivního hyperjemného pole – jeho zvýšení resp. snížení pro tetra- a oktaedrické polohy. Prosím o podrobnější vysvětlení orientací podmříží a příslušných znamének změn.

Práci

doporučuji
uznat jako bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně

Místo, datum a podpis oponenta: Praha, 24. 8. 2012

K. Závěta