

## Posudek disertační práce nazvané:

### „Tvorba a spektroskopická charakterizace chladných molekul a molekulárních radikálů v supersonické plazmatické trysce“

doktoranda

Mgr. Milana Mašáta

#### Přednosti a nedostatky disertace,

##### *Aktuálnost řešeného tématu*

Tématem je vývoj a zdokonalování nových metod pro experimentální studium chladných molekul a radikálů v plynné fázi kombinací metod supersonické expanze plazmatu a spektroskopie. Jedná se o téma na špičkové úrovni v rámci České Republiky a představuje do určité míry přínosný příspěvek k oboru atmosférické chemie radikálů z mezinárodního hlediska.

##### *Použité metody*

Práce shrnuje výsledky získané na základě vývoje a stavby unikátní experimentální aparatury vlastní konstrukce, tento přístup jednak umožňuje provádění nového základního výzkumu i s omezeným rozpočtem a také možnost konfigurovat experimenty, které nejsou snadno realizovatelné pomocí komerčně dostupných přístrojů. Použité metody supersonické expanze a absorpční spektroskopie jsou již delší dobu zavedené a velice vhodné pro daný výzkum. Poměrně originální a nová je metoda tvorby radikálů ve výboji uspořádaném podle této práce.

##### *Formální zpracování*

Práce je psána česky a je dobře čitelná. Zpracování je kvalitní, úvod velice dobře vysvětluje motivaci pro daný výzkum, detaily experimentálních a teoretických metod jsou dostatečně podrobně uvedeny. Co poněkud chybí, je přehled a kritické zhodnocení dosavadního stavu oboru spektroskopie radikálů v supersonické expanzní trysce, stručný přehled v sekci 3.1. zjevně nepředstavuje úplný aktuální referát o rešerši literatury na dané téma. Podobně přehled literatury v dalších sekcích neodráží celkový stav daných tematických oborů ve světě. Silnou stránkou je ale velice pěkné didaktické shrnutí teoretických základů a přesné a konkrétní pojednání o všech detailech konstrukčních prací, testování a experimentálních výsledcích. Chválím také správné uvedení teček za chemickými vzorci radikálů (I když někde chybí, např.  $\text{CH}_3$  na str. 29, molekulární kation  $\text{H}_2\text{O}^+$  je také radikál ...)

Některé převzaté termíny jsou psány podivně: „microkontrolleru“ na str. 70, Wavemetr a Wavemeter na str. 57. Podobně některé vazby nejsou česky správně: např. „opakovací frekvenci ringdown událostí“, což je ale v době běžného používání spojení typu „ou tu aréna“ omluvitelné. Nicméně u česky psané doktorské práce bych přivítal zodpovědnější a pečlivější přístup k tvorbě terminologie. Mezi čísly a jednotkami by měly být mezery.

##### *Výsledky, nové vědecké poznatky.*

Milan Mašát je spoluautorem tří publikací v impaktovaných časopisech uvedených v seznamu literatury: [74, 79, 83]. Jeho konkrétní příspěvek k těmto třem publikacím je výslovně zmíněn v závěru práce: podílel se na konstrukci „mikrokontrolérem řízené zpětnovazební jednotky pro sledování rezonancí“ a naměřil experimentální data pro „přiřazení dosud necharakterizovaných spektrálních čar methanu“. Hlavní význam práce, kromě těchto již publikovaných výsledků, spatřuji v konstrukci zdokonalené aparatury, která bude dále využita pro základní výzkum v oblasti atmosférické chemie. Je škoda, že poznatky o vlivu geometrie výboje v trysce na tvorbu radikálů nebyly publikovány.

Na základě četby práce se nabízejí následující otázky:

1. Proč nejsou diskutovány reference z posledních 5 let uvedené na konci tohoto posudku? Jak se obecná konstrukce popisovaného experimentu liší od uspořádání v nich popsanych?
2. Je naznačeno, že jednotlivá uspořádání výboje popsaná v sekci 4.2. se liší z hlediska dosažitelné nízké teploty  $\text{OH}\cdot$ , která ale není v grafu 4.13 uvedena. Jaké nejnižší teploty se vám podařilo pro tento radikál dosáhnout? Nemá být na straně 92 odkaz spíše na obr. 4.6, u kterého ale není jasné které body odpovídají různým geometriím?
3. Jaký je vliv materiálu katod na vlastnosti výboje?

## **Zhodnocení významu práce pro další rozvoj vědního oboru a případné aplikace výsledků v praxi**

Práce má význam zejména pro další rozvoj experimentálního studia chemie radikálů vytvářených v elektrickém výboji. Praktickým výstupem jsou funkční vzorky důležitých součástí aparatury, u kterých by bylo možno uvažovat o vývoji prototypu.

## **Závěr**

Tato disertační práce prokazuje předpoklady autora k samostatné tvořivé vědecké práci.

Patrik Španěl

V Praze 2. ledna 2013.

- [1] Roberts, M. A.; Savage, C.; Dong, F.; Sharp-Williams, E. N.; McCoy, A. B.; Nesbitt, D. J., Sub-Doppler infrared spectroscopy of CH<sub>2</sub>D radical in a slit supersonic jet: Isotopic symmetry breaking in the CH stretching manifold. *J. Chem. Phys.* 2012, 136(23).
- [2] Freel, K.; Park, J.; Lin, M. C.; Heaven, M. C., Cavity ring-down spectroscopy of the phenyl radical in a pulsed discharge supersonic jet expansion. *Chem. Phys. Lett.* 2011, 507(4-6), 216-220.
- [3] Just, G. M. P.; Rupper, P.; Miller, T. A.; Meerts, W. L., High-resolution cavity ringdown spectroscopy of the jet-cooled propyl peroxy radical C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>. *Physical Chemistry Chemical Physics* 2010, 12(18), 4773-4782.
- [4] Just, G. M. P.; Rupper, P.; Miller, T. A.; Meerts, W. L., High-resolution cavity ringdown spectroscopy of the jet-cooled ethyl peroxy radical C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>O<sub>2</sub>. *J. Chem. Phys.* 2009, 131(18).