



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY
Katedra experimentálnej fyziky
Mlynská dolina F2, 842 48 Bratislava



Posudok

na dizertačnú prácu Mgr. Kristíny Sovovej s názvom:

„Hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými
ionty, SIFT-MS“

Autorka sa v dizertačnej práci zaoberá vysoko zaujímavou a modernou tematikou – hmotnou spektrometriou spojenou s ionizáciou pomocou SIFT techniky (SIFT-MS). Táto technika umožňuje selektívnu chemickú ionizáciu molekúl pomocou vhodne zvolených primárnych iónov a tak nachádza využitie v oblasti detekcie látok v plynnej fáze, alebo na povrchoch. SIFT-MS technika umožňuje i štúdium ión-molekulových reakcií pre vybrané ióny a molekuly. Autorka v dizertačnej práci využila SIFT-MS metódu na štúdium kinetiky ión molekulových reakcií pre isté skupiny molekúl, ako i na detekciu stopových látok v takých rôznych oblastiach ako je detekcia výbušnín, štúdium metabolizmu mikroorganizmov, či VOC uvoľňovaných z rastlín.

Dizertačná práca je písaná v anglickom jazyku a je vhodne členená na kapitoly. Prácu po formálnej stránke, z hľadiska úpravy, členenia a grafického spracovania hodnotím veľmi kladne. Po úvodnej kapitole v ktorej autorka stanovuje ciele dizertačnej práce, sa v druhej kapitole venuje prehľadu hmotovo-spektroskopických techník zameraných na analýzu prchavých organických látok (VOC). Tretia kapitola je zameraná na podrobný popis techniky SIFT-MS, ako i dôležitým ión-molekulovým reakciám používaným v SIFT-MS technike na detekciu VOC. Štvrtá kapitola pojednáva o VOC generovaných mikroorganizmami (baktériami), rastlinami, ako i VOC prítomnými v ľudskom dychu. V piatej kapitole, najdôležitejšej v dizertačnej práci, sa autorka zaoberá samotnými experimentálnymi výsledkami, ktoré získala počas PhD štúdia. V piatej kapitole, autorka obširnejšie prezentuje výsledky a postupy jednotlivých experimentov, pričom najväčšiu časť venovala kinetike ión-molekulových reakcií SIFT reakčných iónov (H_3O^+ , NO^+ a O_2^+) s esterami a izomérmí hexanolu. Podstatná časť výsledkov je prezentovaná v práci formou vedeckých článkov v renomovaných vedeckých časopisoch, ktoré sa



UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

Katedra experimentálnej fyziky
Mlynská dolina F2, 842 48 Bratislava



nachádzajú v prílohách dizertačnej práce. Tieto články prešli prísnyim recenzným konaním v príslušných časopisoch. Publikačná aktivita autorky je vzhľadom na to, že sa jedná o študentku PhD štúdia na vysokej úrovni. Jej podiel na jednotlivých publikáciách je uvedený v stanovisku školiteľa. Autorka prezentuje v dizertačnej práci 7 vedeckých článkov, ktorých je spoluautorkou, pričom prvou autorkou je na troch publikáciách. Články boli publikované v kvalitných vedeckých časopisoch zaradených vo vedeckých databázach.

K dizertačnej práci mám nasledovné otázky:

- 1) Aké sú rozdiely v mechanizme a kinetike ión-molekulových reakcií reakčných iónov a ich vodných klastrov (napr. rozdiely v kinetike medzi H_3O^+ a $\text{H}_3\text{O}^+(\text{H}_2\text{O})$).
- 2) Akú úlohu zohrávajú trojné zrážky c SIFT-MS, pozorovali ste v niektorom prípade produkty typu M.NO^+ ?
- 3) Podarilo sa určiť „limit of detection“ metód použitých na detekciu FOX-7?

Záverom konštatujem, že dizertačnou prácou Mgr. Krystýna Sovová preukázala schopnosť samostatne vedecky pracovať, práca spĺňa všetky nároky kladené na dizertačnú prácu a navrhujem ju po úspešnej obhajobe prijať ako dizertačnú prácu.

V Bratislave 23. októbra 2013

Prof. Dr. Štefan Matejčík, DrSc