

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Petr Dvořák

Název práce: Studium dynamického chování směsi H₂O/D₂O pomocí NMR relaxací

Studijní program a obor: Fyzika, Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2013

Jméno a tituly vedoucího/opponenta: Doc. RNDr. Jan Lang, Ph.D.

Pracoviště: KFNT MFF UK

Kontaktní e-mail: Jan.Lang@mff.cuni.cz

Odborná úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Věcné chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu přiměřený počet méně podstatné četné závažné

Výsledky:

- originální původní i převzaté netriviální kompilace citované z literatury opsané

Rozsah práce:

- veliký standardní dostatečný nedostatečný

Grafická, jazyková a formální úroveň:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Tiskové chyby:

- téměř žádné vzhledem k rozsahu a tématu přiměřený počet četné

Celková úroveň práce:

- vynikající velmi dobrá průměrná podprůměrná nevyhovující

Slovní vyjádření, komentáře a připomínky vedoucího/opponenta:

Hlavním cílem práce P. Dvořáka bylo prozkoumat, zda technikou mnohonásobného spinového echa lze detekovat některé dynamické procesy probíhající ve směsi normální a těžké vody. Touto technikou zkoumal čistou normální vodu S. Meiboom v roce 1961, jiné a novější práce jsme nenalezli, přestože tematika dynamických procesů ve vodě je stále vysoce aktuální. Měření NMR spekter samotné vody se ukázalo jako velmi odlišné od rutinních měření látek v málo koncentrovaných vodných roztocích, kdy je odezva samotné vody různými způsoby potlačována či ignorována. Měření tak narazilo na řadu technických překážek, které se navíc vzájemně prolínaly. Jejich řešení tak zabralo podstatnou část doby vyhrazené pro řešení tohoto diplomového projektu. Velmi oceňuji invenci, vytrvalost a pečlivost, s jakou se kandidát zhostil těchto úkolů. Jedna třída překážek souvisela s časovou nestabilitou vzorku, která se však neprojevila ani na ^1H NMR spektru, ani v ^1H podélné relaxaci, ale právě jen ve výsledku měření příčné relaxační disperze. Bylo zjištěno, že se jedná o současný vliv pronikání atmosférických plynů do evakuovaného vzorku a vymývání iontů ze skla kyvety. K eliminaci těchto vlivů bylo nutné zakoupení zcela nestandardních kyvet s křemenným vzorkovým prostorem a skleněnou částí, kterou lze zatavit v plameni. Z hlediska technik NMR spektroskopie bylo nutné vyřešit problémy spojené s radiačním tlumením („dampingem“) signálu a se zahříváním vzorku velkým množstvím radiofrekvenčních pulzů v důsledku extrémně dlouhých relaxačních dob jader ^1H ve směsi normální a těžké vody. Řešení těchto překážek od kandidáta vyžadovalo hluboké pochopení techniky NMR jak na principiální, tak na technické softwarové i hardwarové úrovni. Pro stabilizaci teploty vzorku byla vyvinuta, naprogramována a odzkoušena specifická pulzní sekvence využívající kombinaci pulzů v rezonanci a mimo rezonanci („on resonance“, resp. „off resonance“), přitom se kandidát musel vypořádat i s nedokumentovanými problémy funkce spektrometru – nezachování fázové koherence při přepínání frekvence pulzního RF pole. Teprve po identifikaci a vyřešení všech nastíněných technických překážek bylo možné přikročit k vlastním měřením. Kandidát provedl měření relaxační disperze na vzorku obsahujícím 2,2 obj.% H_2O v D_2O při několika teplotách. Velmi vysoko hodnotím pokus o interpretaci těchto měření. Tvar získané závislosti poukazuje na přítomnost nejméně dvou procesů, které je provedený experiment schopen zachytit. Kandidát postavil hypotézu, o které reálné chemické procesy by se mohlo jednat, stanovil tvar rovnic příslušných chemických reakcí a z nich odvodil rovnice popisující očekávaný výsledek experimentu.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze: ----

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhují hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/opponenta:

V Praze, 14.8.2013