

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Bc. Petr Dvořák

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

Studijní program a obor: Biofyzika a chemická fyzika

Rok odevzdání: 2013

Jméno a tituly oponenta: Doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.

Pracoviště: KMF

Kontaktní e-mail: Lenka.Hanykova@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 oponenta:

Diplomová práce P. Dvořáka se zabývá experimenty NMR spektroskopie na směsích $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$. Důvod proč studovat zdánlivě strukturně jednoduché molekuly vody autor vysvětluje v úvodu práce: hlubší studie probíhaly před přibližně 60 lety, kdy metody NMR spektroskopie vysokého rozlišení nebyly na takové úrovni jako dnes. Proto by oživení tohoto výzkumu za použití dnešních vyvinutých technik mohlo objasnit anomální chování vody z mikroskopického pohledu.

Práce je vyvážená, co se týče teoretické a experimentální části. Teoretický úvod je věnován současnému stavu poznání o struktuře a vlastnostech vody a principům NMR spektroskopie. Experimentální část obsahuje popis používaných metod, vlastní výsledky měření a jejich interpretaci.

Výsledky práce byly ovlivněny faktem, že během měření autor narazil na několik experimentálních překážek a jejich překonání mu zabránilo v systematickém studiu relaxačního chování molekul v závislosti na složení směsi $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$ a teplotě. Bylo zjištěno, že vzorky jsou nestabilní v čase a že je potřeba věnovat zvýšenou pozornost přípravě vzorků. Autor tak vypracoval podrobný návod pro použití jednotlivých typů NMR kyvet a plnění vzorků. Z praktického pohledu je významná i kapitola týkající se radiačního dampingu, jevu, který ovlivňuje měření vodných vzorků. Kromě vysvětlení tohoto jevu jsou v práci vymezeny koncentrační meze, kdy je vliv radiačního dampingu významný a je tedy nutné použít metody k jeho potlačení. Dále autor navrhl a ve svých experimentech realizoval modifikovanou sekvenci pro měření relaxačních dob, kterou je možné eliminovat změnu teploty, a také zavedl zpřesněný postup pro kalibraci teploty. Všechny tyto metodiky vypracované v předkládané práci naleznou svoje využití především při relaxačních experimentech na vodných roztocích. Na tomto místě bych ráda zdůraznila, že vývoj všech metodických postupů a sekvencí vyžaduje poměrně hlubokou znalost technik používaných v NMR spektroskopii a P. Dvořák ji tímto dostatečně prokázal.

Druhá experimentální část je věnována samotným relaxačním experimentům na směsi $\text{H}_2\text{O}/\text{D}_2\text{O}$. Zde autor provedl sadu měření pro tři teploty a detekoval dva výměnné procesy s různými charakteristickými rychlostními konstantami. Přestože pro přesnou interpretaci dat by bylo potřeba provést měření na více teplotách a pro více směsí a autor to v práci přiznává, jsou naměřená data podrobně diskutována a jsou navrženy tři možné varianty chemických výměn.

Práce je prakticky prostá překlepů a věcných chyb, za zmínku stojí kostrbatý výpočet molárních koncentrací a zlomků na str. 69 a nevhodný formát čísel v tabulce 4.12.

Otázky:

1. Autor v práci navrhuje tři možné interpretace a na základě provedené diskuze se přiklání ke dvěma variantám - přeskoky mezi molekulami HD_2O^+ , HDO a OH^- (a) a přeskoky v molekulárních klastrech (b). Je možné uvažovat o kombinaci obou variant a přisoudit např. rychlý proces variantě a a pomalý proces variantě b?
2. Všechny uvedené závislosti relaxační rychlosti R_2 na echo-čase (např. grafy 4.2, 4.3 a 4.5) jsou systematicky vychýlené pro echo-čas 5 ms. Čím je možné tuto odchylku vysvětlit?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

V Praze, 10.9.2013

doc. RNDr. Lenka Hanyková, Dr.