

Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/uchazečky: **Miriam Basová**

Název práce: Salts of heteroaromatic compounds for NLO

A. Komentář k odbornému zaměření, náplni a rozsahu bakalářské práce (BP)

Předkládaná bakalářská práce se zabývala solemi a adukty 2,4-diamino-1,3,5-triazinu s anorganickými a organickými kyselinami jakožto potencionálními materiály vhodnými pro nelineární optiku. Bylo připraveno celkem 13 nových látek. Tyto látky byly charakterizovány pomocí RTG difrakce na monokrystalu i práškových vzorcích a pomocí Ramanovi a vibrační spektroskopie. Struktura a vlastnosti jednotlivých molekul byly dále modelovány pomocí kvantově chemických výpočtů. U vhodných kandidátů bylo také studováno generování druhé harmonické frekvence.

Práce je předkládána v anglickém jazyce.

Rozsahem experimentálních výsledků práce výrazně překračuje běžný standart.

1. Hodnocení odborné části BP

- | | |
|-------------------------------------|--|
| <input checked="" type="checkbox"/> | A – metodicky přiměřená, data dobře zpracována a interpretována, rozsahem vykonané práce adekvátní |
| <input type="checkbox"/> | B – omezená rozsahem, s drobnými metodickými nedostatky nebo nejasnostmi v interpretaci dat |
| <input type="checkbox"/> | C – nedůsledná nebo s četnými metodickými nedostatky ale odpovídající požadavkům kladeným na BP |
| <input type="checkbox"/> | N – odborně nedostatečná, neodpovídající požadavkům kladeným na BP |

B. Bodové hodnocení jednotlivých částí/aspektů práce

1. Rozsah bakalářské práce (BP) a její členění	
<input type="checkbox"/>	A – přiměřený, odpovídající charakteru BP a významu jednotlivých částí
<input checked="" type="checkbox"/>	B – členění není zcela logické nebo rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s významem
<input type="checkbox"/>	C – výrazně nevyrovnaný, rozsah některých částí zásadně nedostačuje
<input type="checkbox"/>	N – nedostatečné ve více ohledech

2. Odborná správnost	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – výborná, bez závažnějších připomínek
<input type="checkbox"/>	B – velmi dobrá, s ojedinělými drobnými vadami (nejasnosti, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo získaných výsledků)
<input type="checkbox"/>	C – uspokojivá, s čtenějšími drobnými vadami
<input type="checkbox"/>	N – nedostačující, s hrubými chybami

3. Úvod do problematiky a uvedení použitých literárních či jiných zdrojů	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – bez připomínek, všechny převzaté údaje citovány, počet citací odpovídá charakteru BP
<input type="checkbox"/>	B – uspokojivý, místy nedostatečně propracovaný nebo s celkově nižším počtem citací
<input type="checkbox"/>	C – rozsahem neadekvátní charakteru BP nebo s vážnějšími závadami (např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky)
<input type="checkbox"/>	N – nevyhovující, velmi málo citací event. rysy plagiátu (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)

4. Jazyk práce	
<input type="checkbox"/>	A – výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažných gramatických a pravopisných chyb
<input checked="" type="checkbox"/>	B – velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické nebo pravopisné chyby
<input type="checkbox"/>	C – uspokojivý, čtenější neobratné nebo nejasné formulace, gramatické nebo pravopisné chyby
<input type="checkbox"/>	N – nevyhovující; nelogické nebo nesprávné formulace, četné hrubé chyby

5. Formální a grafická úroveň práce	
<input checked="" type="checkbox"/>	A – výborná, bez překlepů a chyb ve formátování
<input type="checkbox"/>	B – velmi dobrá, ojedinělé chyby formátování, překlepy, chybějící zkratky apod.
<input type="checkbox"/>	C – uspokojivá, s ojedinělými závažnějšími nebo čtenějšími drobnými chybami
<input type="checkbox"/>	N – nevyhovující, s četnými hrubými chybami

Případný slovní komentář k bodům B1–5.

Celkově lze jazyk práce považovat za velmi dobrý, i když se studentka nevyvarovala drobných nepřesností a neobratností. To je však pochopitelné, neboť není rodilou mluvčí.

Jak už to u takto rozsáhlých prací bohužel často bývá, velké množství experimentálních dat vede k nevyváženosti práce. Zatímco získaná data jsou prezentována na více než 40-ti stránkách (40 tabulek a 44 obrázků), výsledky jsou diskutovány na pouhých dvou stránkách. Pro celkovou vyváženost práce by bylo vhodné přesunout část experimentálních dat do příloh a prezentovaná data podrobněji diskutovat.

K práci mám ještě několik formálních připomínek:

Zkratka DAMT (2,4-diamino-1,3,5-triazin) je používána jak pro volnou bázi, tak pro protonovanou formu. Pro přehlednost by měla být protonovaná forma báze označována jako HDAMT.

U všech spekter chybí popis vertikální osy.

V tabulkách 3 a 16 je uváděn poměr použité kyseliny a báze. Není však jasné, které číslo popisuje kterou složku.

C. Obhajoba BP

Dotazy k obhajobě

1. V teoretickém úvodu jsou zmiňovány tzv. "pull-push" nebo "push-pull" sloučeniny. Co toto označení znamená?
2. V experimentální části není popsána metoda krystalizace připravených sloučenin ani metoda jejich izolace. Byly krystaly získány volným odpařováním? Jak byly připraveny vzorky pro měření RTG difrakce na práškových materiálech?
3. Řada použitých kyselin se v krystalech nalézá ve své částečně či plně protonizované formě. To je zřejmě závislé na pH roztoku použitého ke krystalizaci. Je toto pH známo? Byla zvažována příprava látek za podmínek s kontrolovaným pH?
4. Všechny studované struktury jsou stabilizovány hustou sítí vodíkových vazeb. V práci jsou diskutovány různé typy vodíkových vazeb mezi molekulami DAMT. Nikde však není udána jejich délka, popřípadě, jak se liší mezi jednotlivými strukturami. U systému DAMT Cl je zmiňována ne zcela obvyklá vodíková vazba N-H...Cl. Jaká je její délka?
5. Generování druhé harmonické frekvence bylo měřeno při jedné vlnové délce. Jak se mění pro různé vlnové délky? Jaká je vzájemná geometrická poloha zdroje a detektoru? Proč se využívá pro měření velice krátkých pulzů?

Stanovisko k opravě chyb: opravný lístek/oprava v textu **NENÍ** podmínkou přijetí práce

D. Celkový návrh

Práci doporučuji k přijetí k dalšímu řízení: **ANO**

Navrhovaná celková klasifikace: **v ý b o r n ě**

Datum vypracování posudku:

5. 9. 2015

Jméno a příjmení, podpis oponenta:

doc. RNDr. Vojtěch Kubíček, Ph.D.