

Posudek oponenta bakalářské práce
předkládané
Kristýnou Sovovou
studentkou 3. ročníku Přírodovědecké fakulty Univerzity Karlovy v Praze,
práce nazvané
Studium produktů rozkladu PET pomocí vysoce rozlišené FT-IR spektroskopie a plynové chromatografie

Bakalářská práce Kristýny Sovové je věnována zajímavému tématu aplikace citlivé spektroskopické techniky při sledování produktů řízeného spalování. Na příkladu identifikace produktů spalování polyethylentereftalátu (PET), významného zástupce v kontextu odpadového hospodářství, autorka práce zřetelně demonstruje možnost využití dvou pokročilých instrumentací, a to vysoce rozlišené infračervené spektrometrie s Fourierovou transformací a plynové chromatografie s hmotnostním spektrometrem, jak na poli environmentálním, tak v oblasti bezpečnosti a ochrany zdraví při práci. Předkládaná práce by tak mohla například posloužit jako metodický základ pracovníkům zabývajícím se hodnocením inhalační expozice chemických látek v pracovním ovzduší. Porovnání výsledků identifikace spalin provedené na základě FT-IR a GC-MS analýzy by bylo dle mého názoru rovněž vhodné publikovat v některém z periodik zaměřených na využití chemicko-analytické instrumentace v bezpečnostním nebo environmentálním inženýrství.

Vlastní práce, obsahující řadu tabulek, obrázků a grafů, je členěna do tří základních částí:

1. *Teoretická část* čtenáře stručně seznamuje se základními pojmy z oblasti infračervené spektroskopie a dále speciálně s principem FT-IR. Tento přehled je užitečný jako úvod pro pochopení strategických a operačních postupů aplikovaných v experimentální části práce, která tak spolu s částí teoretickou tvoří kompaktní logický celek bez nadbytečných informací.
2. *Experimentální část* přináší stručný, ale postačující popis provedených experimentů spolu s podrobným přehledem použité instrumentace. Experimentální část a kapitoly Výsledky a diskuze považuji za těžiště celé bakalářské práce.
3. Část *Výsledky a diskuze* obsahuje ukázky změřených vysoce rozlišených infračervených spekter produktů řízeného spalování PET. Srovnáním s databází HITRAN a spektry čistých látek autorka provedla jejich identifikaci. Ve stručné diskusi zároveň porovnála výsledky identifikace produktů provedené na základě FT-IR měření a na základě GC-MS analýzy. Ukázala tak, že pomocí obou technik lze bezpečně identifikovat základní produkty spalování a že v detailech mohou být obě metody komplementární. Velmi oceňuji konfrontaci dosažených výsledků s literaturou. Užitečná je stručná diskuze toxikologických aspektů identifikovaných produktů spalování, uvedená v závěru kapitoly.

Chtěl bych zdůraznit, že práce má jasnou strukturu, je napsána přehledně, s rozvahou a pečlivostí, o které svědčí m.j. také vysoká grafická a stylistická úroveň zpracování. K práci nemám žádné závažné výhrady; je prosta i drobných formálních chyb s výjimkou zápisu rovnic na str. 15., kdy vlnčet bývá označován zpravidla symbolem $\tilde{\nu}$ a diferenciál dx (nikoliv $d(x)$), a chyby v jednotkách na str. 10 ř. 8. sh., kde by vlnové délky charakteristické pro infračervené záření měly být uvedeny v μm a ne v mm .


Autorku bych chtěl požádat o zodpovězení následujících dvou dotazů:

- 1) Obrázek 22 na straně 27 znázorňuje spektrum obsahující rotačně-vibrační linie plynného oxidu uhelnatého ve dvou (P- a R-) větvích. Mohla byste vysvětlit, proč se ve spektru nevyskytuje Q-větev?
- 2) Pokud byste jako zodpovědný pracovník podniku stála před rozhodnutím, zda použít pro průběžné monitorování produktů řízených spalovacích procesů instrumentaci GC-MS nebo FT-IR, pro kterou z nich byste se rozhodla a proč?

Závěrem konstatuji, že předkládaná práce splňuje požadavky kladené na bakalářskou práci. Myslím, že autorka zřetelně prokázala schopnost samostatné práce jak s domácí i zahraniční odbornou literaturou, tak při přípravě a vlastním provedení experimentální části práce, a konečně i při vyhodnocení a analýze změřených originálních dat. Při tom si musela kromě prohloubení teoretických základů některých partií spektroskopie vysokého rozlišení osvojit též řadu speciálních experimentálních návyků souvisejících s použitou instrumentací FT-IR a GC-MS.

Práci doporučuji k obhajobě.

V Praze dne 4.6.2007


RNDr. Ing. Michal Střížík, Ph.D.

Laboratoř výzkumu a managementu rizik,
Fakulta bezpečnostního inženýrství,
Vysoká škola báňská – Technická univerzita, Ostrava
&
Centrum inteligentních systémů a struktur,
Ústav termomechaniky Akademie věd ČR, Praha

