

Posudek práce

předložené na Matematicko-fyzikální fakultě
Univerzity Karlovy v Praze

- posudek vedoucího posudek oponenta
 bakalářské práce diplomové práce

Autor/ka: Ondřej Novák
Název práce: NMR relaxace jader ^1H v glycerolu
Studijní program a obor: Fyzika - obecná fyzika
Rok odevzdání: 2008

Jméno a tituly vedoucího/oponenta: Doc. RNDr. Helena Štěpánková, CSc.
Pracoviště: Katedra fyziky nízkých teplot MFF UK
Kontaktní e-mail: helena.stepankova@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/oponenta:

Bakalářská práce pana O. Nováka je věnována studiu relaxačních parametrů jaderné magnetické rezonance jader ^1H v systému glycerol – voda, resp. těžká voda, a jejich závislosti na koncentraci jednotlivých složek směsi. Byla změřena spektra a relaxační doby T_1 , T_2 systematicky připravených koncentračních řad směsí; největší počet měření byl proveden pro směs glycerol-těžká voda. Autor změřil kvalitní spektra, ve kterých pozoroval a komentoval zajímavé projevy chemické výměny vodíkových atomů skupin OH glycerolu a vody projevující se výraznou závislostí šířek spektrálních čar výměnných vodíků na obsahu glycerolu.

Hlavním cílem práce bylo ocenění relativní váhy intermolekulární a intramolekulární dipól - dipólové interakce jakožto příčiny relaxačních procesů pomocí srovnání výsledků na systémech glycerol - těžká voda a glycerol - voda. Závěr, že významnější je intramolekulární mechanismus, je dokumentován v textu a na několika grafech, velmi přehledně např. na obr. 6.9. Autor velmi pečlivě uvážil okolnosti experimentu komplikující analýzu výsledků, jako např. zbytkový obsah HDO v použité těžké vodě.

Úkol bakalářské práce pana O. Nováka byl poměrně obtížný: teorie relaxačních procesů není jednoduchá záležitost, a navíc systém glycerol – voda s chemickou výměnou obsahující dokonce více než dvě neekvivalentní pozice je z tohoto hlediska dosti komplikovaný. Motivací pro volbu tohoto systému bylo patrně navázat na klasické experimenty autorů Bloemberga et al., které je dnes možno provést na kvalitativně vyšší úrovni. Cenné je, že pan O. Novák (kromě samotných experimentálních dat a jejich vyhodnocení) byl schopen rozebrat se v dané problematice a povšimnout si a zhodnotit i úskalí, které řešení úkolu přineslo.

K textu práce mám několik výhrad týkajících se především nepřesných nebo nevhodných formulací, které se objevují hlavně v kapitole 2 - Teorie. Uvedu jen některé: např. na str.6 namísto „z modelu vyplývalo“ doporučuji „model předpokládal“, na str.7 „vztah mezi spinem ... upravuje...“ nahradit „vztah mezi spinem ... je dán úměrou...“ . V některých místech typu „z kvantové mechanických úvah dostaneme...“, kde není postup nijak naznačen, by bylo vhodné uvést citaci. Dále by bylo vhodné odlišit symbol pro operátor spinu (stříškou, fontem apod.) od symbolu pro kvantové číslo. Ve vztazích 2.44-cgs se objevují explicitní exponenciální členy s časovou závislostí, které v přepisu dipól-dipólové interakce z 2.42 do sférických souřadnicích v laboratorní soustavě nemohou vzniknout. V tab. 5.6 a 5.7 jsou přehozeny nadpisy délek pulsů. Zpracování výsledků je přehledné, grafická úprava práce je velmi pěkná.

Závěrem konstatuji, že z bakalářské práce je zřejmé, že pan O. Novák se orientoval v poměrně obtížné problematice a zvládl řešení zadaného úkolu. Považuji jeho bakalářskou práci za vynikající a doporučuji k obhajobě.

Případné otázky při obhajobě a náměty do diskuze:

1. Dotaz ke spektrům směsi glycerol-těžká voda s malými koncentracemi glycerolu: je spektrum OH skupin glycerolu tvořeno jednou, nebo dvěma čarami? Z grafů to není patrné.
2. Dotaz k chemické výměně a spektrům směsi glycerol-těžká voda: je možné diskutovat v rámci chemické výměny rozšíření a ztrátu rozlišení multiplerní struktury u čar jader atomů vodíků přímo vázaných na C?
3. Dotaz k chemické výměně a jejímu vlivu na spektrum výměnných vodíků: autor diskutoval pouze závislost na koncentraci glycerolu ve směsi; jakým způsobem se podle autora může projevit změna viskozity?
4. Dotaz k měřením relaxačních dob – do jaké míry odpovídaly sledované závislosti na proměnném časovém parametru exponenciální funkci? Byl zjišťován průchod nulou pro měření T_1 i na spektrometru vysokého rozlišení? Pokud ano, do jaké míry se výsledek shodoval s fitem celé závislosti?

Práci

doporučuji

nedoporučuji

uznat jako diplomovou/bakalářskou.

Navrhuji hodnocení stupněm:

výborně velmi dobře dobře neprospěl/a

Místo, datum a podpis vedoucího/oponenta:

Praha, 13.6.2008

