

**Oponentský posudok práce Zuzany Flenerovej
„Experimentální výskum reakcií iontů CN^- , C_2N_3^- a C_3HN_2^- probíhajících v ionosféře Titanu“**

Ako názov práce napovedá, autorka skúma reakcie uvedených záporných iónov s vybranými neutrálnymi látkami, ktoré sa vyskytujú v atmosfére Titanu pomocou hmotnostnej spektrometrie. Motívom práce je prispieť k objasneniu vzniku ťažkých záporných iónov, ktoré boli detekované v ionosfére Titanu.

Práca je rozdelená na päť sekcií: „Úvod“, „Teoretická časť“, „Experimentální časť“, „Výsledky a diskuze“ a „Závěr“. V Úvode nás autorka stručne oboznamuje s relevantnými poznatkami o atmosfére Titanu a predkladá motív a cieľ práce. Na začiatku Teoretickej časti sa autorka obšírnejšie venuje popisu Titanu a jeho atmosféry, a projektu Cassini-Huygens, ktorý priniesol informácie o atmosfére Titánu. Ďalej sa v Teoretickej časti venuje princípom hmotnostnej spektrometrie, a to ionizačným technikám, metódam hmotnostnej separácie iónov a ich detekcie. Teoretická časť je zakončená popisom synchrotrónu Soleil, kde bola získaná časť výsledkov prezentovaných v práci. Na začiatku Experimentálnej časti autorka popisuje prípravu chemikálií, ktoré potrebuje na uskutočnenie experimentu. Ďalej predstavuje prístroje, na ktorých experiment vykonávala. Jedná sa o komerčný hmotnostný spektrometer používaný v laboratóriu školiteľa a hmotnostný spektrometer CERISES, pomocou ktorého vykonala experimenty v synchrotrónu Soleil. Experimentálna časť končí detailnejším popisom prípravy experimentu. Sekcia „Výsledky a Diskuze“ začína prezentáciu a interpretáciu nameraných hmotnostných spektier produktov skúmaných reakcií. Ďalej sa autorka venuje vybraným reakciám a uvádza závislosti intenzity produktov od tlaku plynu neutrálnych reaktantov v kolíznej cele. V poslednej časti tejto sekcie autorka prezentuje výsledky skúmania reakcií CD_4 s iónmi O^+ v rozličných energetických stavoch, ktoré získala pomocou prístroja CERISES v synchrotrónu Soleil. V Závere autorka zhŕňa získané poznatky.

K predkladanej práci mám niekoľko pripomienok:

- Autorka venuje málo miesta prehľadu súčasného stavu problematiky. Naopak, zbytočne veľa textu je venované projektu Cassini-Huygens.
- Autorka často používa sekundárne zdroje z internetových stránok. Ocenil by som citovanie pôvodnej literatúry.
- Autorka miestami používa heslovitý štýl písomného prejavu, ktorý nie je vhodný pre prácu tohto typu (napr. popis veličín použitých v rovniciach, text v časti „2.5 Chemikálie“)
- Str. 18 – vysvetlenie princípu kvadrupólového hmotnostného analyzátora nie je korektné. Veličiny a_U a q_V sú bezrozmerné nezávislé premenné v Mathieuovej rovnici. Využívame fakt, že trajektória iónu je stabilná len pre určité hodnoty $\{a_U, q_V\}$. Ak sa kvadrupól používa ako hmotnostný filter, pracuje sa v okolí bodu $\{a_U, q_V\} \cong \{0.237; 0.706\}$, ktorý je na hranici oblasti stability. Dosadením týchto hodnôt do rovníc na str. 17 dostaneme vzťah, ktorý nám určuje závislosť medzi m/z a U resp. V .
- Str. 23, časť „2.5 Chemikálie“ – malononitril má dva vodíky a nie jeden. Navyše malononitril a dikyanamid by nemali byť označené ako anión.
- Časť „3.2 Syntézy“:
 - autorka používa vo väčšine prípadov tzv. funkčný vzorec ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CN}$). Bolo by dobré zachovať pravidlo písania funkčných vzorcov všade

- chýbajú odkazy na literatúru
- časť „3.2.2. Syntéza kyanovodíku“ – aké sušidlo bolo použité?
- Str. 37 a 38 – autorka prezentuje tlakové závislosti reakcií $C_2N_3^- + HCN$ a $C_3HN_2^- + HCN$. V práci mi chýbajú hmotnostné spektrá pre tieto reakcie. Akým iónom zodpovedajú hmotnosti $m/z = 66, 93, 120$ v grafe na obr. 26 a $m/z = 65, 92, 119$ v grafe na obr. 27?
- Str. 37, obr. 25 – nesprávne identifikované ióny v hm. spektre:
 - namiesto $CN\cdot HCN$ má byť CN^- ($m/z = 26$)
 - namiesto $CNO\cdot HCN$ má byť CNO^- ($m/z = 42$)
 - namiesto $CN\cdot [HCN]_2$ má byť $CN\cdot HCN$ ($m/z = 53$)
 - namiesto $CNO\cdot [HCN]_3$ má byť $CNO\cdot [HCN]$ ($m/z = 69$)
 - namiesto $CN\cdot [HCN]_3$ má byť $CN\cdot [HCN]_2$ ($m/z = 80$)
 - namiesto $CN\cdot [HCN]_4$ má byť $CN\cdot [HCN]_3$ ($m/z = 107$)

V práci sa ďalej vyskytujú nasledujúce formálne nedostatky:

- Str. 5 - ref. [16] nie je číslovaná postupne
- Str. 6 – ref. [5] nie je číslovaná postupne
- Str. 7 – ref. [32] nie je číslovaná postupne
- Str. 8 – ref. [33] nie je číslovaná postupne
- Str. 17 – chyba popis veličín v rovniciach
- Str. 23 – nadpis „Experimentální část“ nie je očíslovaný
- Str. 23 – časť „Chemikálie“ je nesprávne očíslovaná
- Vzorce a rovnice by mohli byť očíslované

K práci mám tieto doplňujúce otázky:

1. V časti „3.2.3 Syntéza acetylenu“ autorka píše: „Plyn byl vyvíjen kontinuálně a po době, kdy acetylen vytěsnil veškerý vzduch ze vzorkovnice, byli oba dva kohouty uzavřeny.“ Ako autorka určila dobu, „kdy acetylen vytěsnil veškerý vzduch ze vzorkovnice“?
2. Ako by sa dali interpretovať namerané tlakové závislosti na obr. 26 a 27?
3. Prečo pri reakciách CD_4 s excitovanými stavmi $O^+(^2D)$ a $O^+(^2P)$ prevláda disociatívny prenos náboja oproti reakcii so základným stavom $O^+(^4S)$?

Napriek uvedeným pripomienkam hodnotím predloženú prácu pozitívne a odporúčam ju prijať ako bakalársku prácu.

V Prahe, 29.5.2012,

RNDr. Juraj Jašík, PhD.
oponent