



Posudek diplomové práce „Určení strukturního stavu uhlíkaté hmoty metasedimentárních hornin pomocí Ramanovy spektrometrie“ autora Bc. Šimona Kdýra

Přírodovědecká fakulta Univerzity Karlovy
Ústav geochemie, mineralogie a nerostných zdrojů
vedoucí diplomové práce Prof. RNDr. Jan Jehlička, Dr.

Diplomová práce Šimona Kdýra se zabývá možnostmi detekce a strukturní charakterizace uhlíkatých materiálů v metasedimentárních horninách Ramanovou spektrometrií pomocí laboratorních a přenosných spektrometrů. Práce navazuje na již tradiční kvalitní analytické studie laboratoře Prof. Jana Jehličky.

Úvodní, obsáhlá, zajímavá a poměrně přehledně uspořádaná teoretická část se věnuje grafitizaci organické hmoty v geologickém prostředí a za laboratorních podmínek, metodám studia uhlíkaté hmoty v geovědách a popisu Ramanových spektrometrů. Kapitola je zakončena podrobným popisem strukturních parametrů a jejich využití při popisu stupně grafitizace a využití Ramanova spektrometru jako termometru.

V metodické části autor popisuje jednotlivé koncepční kroky diplomové práce od odběru poměrně atraktivní kolekce alpských vzorků a jejich přípravě pro měření ve formě nařezaných kostek, leštěných nábrusů a práškových vzorků. Pro srovnání byly použity i neupravené původní vzorky. Obsah uhlíku ve vzorcích byl stanoven elementární analýzou.

Spektrální data byla získána jak pomocí stolních laboratorních Ramanových mikrospektrometrů, tak i využitím mobilních/přenosných spektrometrů. Celkem bylo použito 9 různých přístrojů o různých vlnových délkách excitačního záření. Autor diplomové práce naměřil pozoruhodně velký soubor dat a výsledkem je porovnání rozptylu hodnot poloh vrcholů G, D1 a D2 pásů, jejich pološířek a poměru jejich intenzit.

Ve stěžejní kapitole „Výsledky“ nalezne čtenář spektra uhlíkatých materiálů a bohatý grafický materiál umožňující porovnání hodnot vybraných strukturních parametrů vzorků pro jednotlivé přístroje, vlnové délky excitačních laserů stolních a přenosných přístrojů. Práce je graficky velmi příjemná a je psána pěknou češtinou bez překlepů. K práci mám následující dotazy resp. připomínky:

- Bylo nalezeno, že vzorky adjustované jako nařezané kostky mají větší průměrné hodnoty pološířek pásů než nábrusy, a to téměř ve všech případech. Je možné, že tepelné namáhání při řezání vzorku zvyšuje stupeň grafitizace? V literatuře se objevila podobná zmínka o leštěném nábrusu.
- U většiny spekter se nevyskytuje téměř žádný šum. Byla spektra hlazena? Jaký byl většinou měřicí čas a počet skanů?

- **Kterému přenosnému Ramanovu spektrometru byste dal přednost pro stanovení stupně grafitizace uhlíkatých materiálů?**

Závěrem lze konstatovat, že autor vykonal značný objem experimentální práce, v závěru správně interpretuje získaná data- Práci doporučuji k obhajobě.

V Praze 7. 9. 2017

**Ing. Vladimír Machovič, CSc.
VŠCHT v Praze**