

Posudek oponenta na diplomovou práci

Autor: Petra Nedvědová

Název: QSPR a elektrochemická oxidace benzoxazolů

Studijní obor: analytická chemie

Označte křížkem nejhorší → nejlepší

D C B A

Úroveň definování cílů práce a kvalita jejich splnění

(jsou cíle práce jasně formulované a jsou dosažené výsledky vytčeným cílům odpovídající)

X

Originalita práce (přináší původní vědecké výsledky; rozšiřuje současná řešení problému; je variantou známých přístupů; opakuje známá řešení)

X

Přínos práce pro analytickou chemii (přináší zcela novou metodiku; výrazně vylepšuje dosavadní analytické postupy; je určitou variantou používaných analytických postupů; využívá standardních analytických metodik a postupů pro řešení problémů z jiných oborů)

X

Forma členění práce (vhodnost členění na kapitoly, vyváženost rozsahu jednotlivých kapitol, přiměřenost počtu obrázků a tabulek)

X

Zpracování úvodu k řešené problematice (informační bohatost úvodních kapitol, relevantnost a úplnost citované literatury)

X

Zpracování experimentální části práce (kvalita a úplnost popisu použitých materiálů a metodik)

X

Zpracování výsledků práce (způsob zpracování experimentálních výsledků, jejich logické uspořádání a vysvětlení, kvalita dokumentace presentovaných závěrů)

X

Jazyk a stylistická úroveň práce

X

Formální provedení práce (tiskové chyby, forma provedení obrazové a tabulkové dokumentace, dodržování konvencí psaní symbolů veličin, jednotek atp.)

X

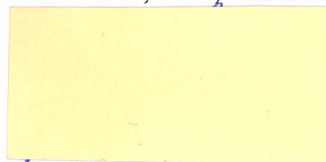
Celkové zhodnocení práce, A-D (mělo by akcentovat obecně přístup studenta k řešení a zpracování zadané problematiky)

A-B

Konkrétní otázky a připomínky k práci viz zvláštní papír jako příloha k tomuto dokumentu.

Posudek vypracoval

Doc.RNDr. Jiří Zima, CSc., 7.5.2007



Otázky a připomínky k diplomové práci Petry Nedvědové
QSAR a elektrochemická oxidace benzoxazolů

K práci mám určité formální připomínky:

Členění práce je trochu fragmentované – 46 stran a 33 nadpisů kapitol
Str. 5 aj. – místo pojmu kapacitní poměr se užívá pojem retenční faktor

9 – ... kyseliny karboxylové ... se píše obráceně

11 - fluorfenyl (ne fluorofenyl)

11 – uvádění vzorců antibiotik možná nebylo nutné, na druhou stranu ovšem neškodí.

Dále je v práci pár překlepů, např. OSAR místo QSAR(13), dimetyl... místo dimethyl(15), amino skupina vs. aminoskupina (dtto nitroskupina), voltmetrická (16), kvanifikován (26)..., tyto však jsou snadno odhalitelné a pro čtenáře nepředstavují nějaké zavádějící nebezpečí.

Dále mám některé dotazy:

Proč byla zvolena zrovna průtoková rychlost MF $0,8 \text{ ml min}^{-1}$?

Z korelací nejvíce vybočuje látka č. 7. Co by mohlo být příčinou?

Také látka č. 20 se poněkud vymyká z korelací. Jaký je možný důvod této skutečnosti?

34 – Píky nejsou příliš symetrické, je na vině spíše výběr MF či čistota látek?

Zvolené MF jsou dosti podobné, získané korelace také. Co vedlo k jejich výběru? Bylo by možné pro jeden modifikátor MF získat jednu „průměrnou“ korelaci?

Tvrzení v závěru (str. 39) a na str. 27, že přítomnost aminoskupiny značně snižuje hodnotu anodického půlvlnového potenciálu není úplně jasné.

Aminoskupina se totiž oxiduje klasicky mnohem dříve než zbylá část skeletu látek. Na voltamogramech by měl tedy být ještě jeden signál oxidovatelného zbytku molekuly. Bylo tomu tak, či tento signál již zaniká v pozadí či nelze věrohodně vyhodnotit?