

## Posudek oponenta diplomové práce

**Autor práce:** Bc. Pavla Doležánová

**Název práce:** Stanovení aromatických nitrosloučenin pomocí GC-MS.

Bc. Pavla Doležánová se v diplomové práci zabývá analýzou vybraných nitrosloučenin po výbuchu různých výbušných směsí pomocí optimalizované GC-MS metody.

V teoretické části diplomantka popisuje vlastnosti jednotlivých nitrosloučenin a věnuje se základům instrumentálních technik, které ve své práci využila. Dále velmi rozsáhle diskutuje publikované práce zaměřené na izolaci a samotnou analýzu aromatických nitrosloučenin. V experimentální části jsou popsány podmínky a postupy stanovení, závěrem jsou diskutovány dosažené výsledky, které jsou doloženy obrázky a tabulkami.

Diplomová práce je prezentována přehledně s logickým členěním textu do jednotlivých kapitol. V práci se vyskytuje pouze menší množství překlepů či typografických chyb, někdy se vyskytují i chyby gramatické (čisticí vs. čistící, atd.). Z formálního hlediska bych vytkla horší kvalitu obrázků, které jsou zřejmě pouze kopírované z použitého programu na vyhodnocení dat. Další formální či věcné připomínky jsou formulovány níže.

### Formální připomínky:

- Kapitoly 2.3.2 a 2.3.3 v experimentální části již diskutují samotnou optimalizaci a mohly by být zařazeny ve výsledkové části. V experimentální části se zpravidla píšou pouze postupy stanovení. Naopak v diskuzi na str. 51 je uveden přesný postup přípravy vzorku, který by měl být zařazen v experimentální části.
- Termín kazeta u SPE se v českém jazyce příliš nevyužívá a z angličtiny se překládá jako SPE patronka.
- V teoretické části diplomové práce není potřeba tak rozsáhlá diskuze již publikovaných prací i s obrázky. Rešerše by měla stručně seznámit čtenáře s danou problematikou a s prezentovanými pracemi na dané téma. Samotná diskuze a porovnání experimentálních dat s publikovanými daty se běžně provádí až ve výsledkové části.
- Zkratka SEI není vysvětlena, ani se nevyskytuje v seznamu zkratk.
- Výsledky jsou popsány velmi stroze a těžkopádně. Dosažené výsledky by bylo dobré více komentovat a vysvětlit.

### Věcné připomínky a náměty k diskuzi:

- Podílela se diplomantka na odběru vzorku?
- Str. 45 - Co si diplomantka představuje pod pojmem „dobrý a přijatelný výsledek“ u optimalizace separace? Dala by se kvalita separace popsat nějakým kvalitativním parametrem?
- Tabulky 3,4,5 – str. 42 – V případě, že uvedené nitrolátky mají více izomerů, jaký byl použit do výbušných směsí? Proč byly navažovány jiné poměry látek do různých výbušných směsí? V celé práci není diskutováno, proč byl použit chlorečnan draselný, chloristan draselný či amonný a jaký byl jeho vliv na výsledné produkty výbuchu.
- Kalibrační závislosti – na jeden parametr je potřeba 5 experimentálních bodů. Pokud diplomantka dělala kalibrace na pěti koncentračních hladinách celkem třikrát, mohla mít

15 experimentálních bodů a 5 odlehlých mohla odstranit. Proč dělala průměr z hodnot? U 2,6-DNT pak zůstaly po neúspěšné validaci pouze tři body v kalibraci a jeden z nich dokonce s chybou 19,67%. Po odstranění i tohoto bodu by zbyly pouze dva body.

- V tabulce 11 je další chyba větší než 15% u 1,8-DNN. Diplomantka v diskuzi tvrdí, že tyto body byly odstraněny.
- Tabulka 12 –  $R^2$  není odchylka, ale koeficient determinace. Byla testována významnost absolutního členu?
- Str. 52 – Diplomantka popisuje, že nemohla být provedena kvantifikace, protože byl měněn filament. Bylo ověřeno, že výměna způsobí závažné změny v kvantitativním stanovení? Jakým způsobem je to možné ověřit? Dala by se použít jiná metoda pro kvantitativní určení množství sledovaných látek?
- Str. 52 – tabulky 14,15,16 – v tabulkách nemůže být uveden obsah stanovovaných látek, protože nebyl zjišťován.
- Str. 54, obr. 19 – Zamyslela se diplomantka, čemu odpovídají další píky, kromě identifikovaných *m*-NT a 2,4-DNT?

Závěrem mohu konstatovat, že diplomantka Pavla Doležánová splnila i přes výše uvedené připomínky zadání diplomové práce. Doporučuji tuto diplomovou práci k obhajobě a hodnotím ji

C.

doc. Ing. Lenka Česlová, Ph.D.