



Věc: **Posudek vedoucího diplomové práce**
Název práce: **Infračervená a Ramanova spektra izotopově značených esterů kyseliny dusičné**
Autor práce: **Bc. Ondřej Poul**

Diplomová práce **Bc. Ondřeje Poula** se zabývá problematikou izotopově značených esterů kyseliny dusičné (obecně isotopologů) a jejich využití pro infračervenou a Ramanovu spektroskopii.

Jako kandidáti pro přípravu a vyhodnocení byly vybrány látky methyl-nitrát, isopropyl-nitrát, nitroglycerin a tetranitrát pentaerythritolu (pentrit). Volba nitroglycerinu je zvláště vhodná z důvodu dostupnosti tří různých výchozích izotopologů glycerolu-¹³C a dále možností esterifikovat glycerol na nitroglycerin-¹⁵N₃, případně v budoucnu rozšířit na nitroglycerin-(¹⁸NO₂)₃, jak diplomant doporučuje v závěru. V teoretické části diplomové práce byla provedena literární rešerše, zejména publikovaných postupů přípravy a infračervených spekter vybraných esterů kyseliny dusičné. Pro publikaci v časopise bude třeba tuto část doplnit o vypočtená spektra, včetně detailního prozkoumání literárních zdrojů týkajících se nitroglycerinu.

V praktické části jsou zdokumentovány postupy příprav, rozpracována a používána metoda esterifikace v prostředí dichlormethanu. Laboratorní zdatnost diplomanta se v průběhu diplomové práce výrazně zlepšila. Diplomant práci průběžně konzultoval a s organizací práce nebyly potíže.

Rozsáhlou částí jsou výsledky a diskuze, kde autor práce detailně porovnává pásy, detailně porovnává spektra a jsou vyvozeny závěry, které nejsou v literatuře dosud publikovány.

V práci lze nalézt několik menších nedostatků, nicméně diplomat se dokázal vypořádat s poměrně složitou interpretací některých pásů ve spektrech a uvádí poctivě i záležitosti, které se interpretovat nepodařilo. V oblasti interpretace izotopově značených analogů jedné látky je totiž snadné se v záležitosti „ztratit“ a také běžně dochází k tomu, že s novými poznatky se souběžně vynoří otázky, které se podaří zodpovědět až v budoucnosti. Diplomovou práci považuji za přínos v oboru infračervené a Ramanově spektroskopii energetických materiálů. Po doplnění teoretických výpočtů spekter lze výsledky publikovat v odborném časopise.

Doporučuji práci k obhajobě a celkovou úroveň výstupu řešení hodnotím stupněm **výborně -, B.**

V Pardubicích, dne 27. 5. 2020

doc. Ing. Zdeněk Jalový, Ph.D.