

## Posudek vedoucí diplomové práce

---

<b>Diplomant:</b>	<b>Bc. JAN KAREL</b>
<b>Diplomová práce:</b>	<b>Aplikace FTIR spektrometrie v analýze automobilových benzínů a motorových naft</b>
<b>Vedoucí DP:</b>	<b>doc. RNDr. Jaroslava Machalíková, CSc.</b>

---

Diplomant se v předložené práci zabývá aktuální problematikou aplikace moderních přístrojových a výpočetních metod, která představuje významný pokrok v oblasti analýzy motorových paliv. Jako hlavní experimentální techniku použil infračervenou spektrometrii, jejíž výsledky zpracoval s využitím chemometrických metod. Navrhl chemometrické modely pro stanovení oktanového čísla benzínů a obsahu biosložky v motorové naftě s využitím infračervené spektrometrie s Fourierovou transformací. Jako doplňující metodu pro hodnocení frakčního složení benzínů aplikoval plynovou chromatografii.

Rychlé rutinní stanovení oktanového čísla resp. obsahu MEŘO jako vybraných fyzikálně-chemických parametrů metodou FTIR spektrometrie s následnou aplikací statistických výpočtů má pro praxi velký význam – ze spektra, změřeného rychle a jednoduše, je možno určit parametr, jehož stanovení je časově (případně finančně) podstatně náročnější. Podobný postup lze aplikovat i na další ukazatele jakosti provozních kapalin (cetanové číslo, viskozitu, hustotu, bod tuhnutí, bod vzplanutí, TAN, TBN aj.) – z jediného spektra lze výpočtem určit řadu důležitých parametrů, přičemž pro každý z nich by běžným analytickým postupem bylo nutno provést samostatné stanovení vyžadující speciální přístrojové vybavení. Možnost stanovit více parametrů z jednoho spektra je hlavní výhodou těchto postupů.

V oblasti FTIR spektrometrie jsou tyto metody často využívány – především tehdy, není-li závislost mezi absorbancí či transmitancí a koncentrací měřených analytů resp. hodnotou příslušných ukazatelů lineární. Při kvantitativní analýze lze využívat maticový počet a statistické zpracování dat (např. metodami Simple Beers law, PLS a PCR použitými v této práci); vyhodnocují se pak celé spektrální oblasti. Multikomponentní metody je vhodné použít v případě, kdy matrice analyzovaných vzorků není přesně definovaná nebo dochází k překrytí spektrálních pásů; jejich nevýhodou je jednak složitý matematický aparát, jednak nezbytnost velkého počtu standardů nutných k vytvoření spolehlivého kalibračního modelu. Rovněž je třeba dbát na to, aby podmínky měření všech spekter i způsoby jejich úprav a zpracování byly zachovány od kalibračních přes validační až po analyzované neznámé vzorky. Přitom vývoj robustních kalibračních modelů a jejich řádná validace jsou klíčovými a poměrně náročnými kroky kvantitativní analýzy pomocí IČ spektrometrie. Použití validačních standardů je nutné pro hodnocení kalibračního modelu. Všechny tyto aspekty diplomant v práci podrobně diskutuje.

Práce má celkem 90 stran + přílohy, je v souladu se směrnicí UPA č. 13/2007. Seznam použité literatury (včetně elektronických informačních zdrojů) zahrnuje 38 položek.

Přínosem práce je především její experimentální a navazující výpočtová část. Autor zde provedl řadu laboratorních měření – pracoval se vzorky, které mu poskytla společnost Česká rafinérská,

a. s., Litvínov, a se vzorky, které si sám zajistil odběry na pěti čerpacích stanicích v období říjen 2010–duben 2011. Sestavil kalibrační modely a provedl jejich validaci. Vzhledem k tomu že se na DFJP jedná o první práci na téma multikomponentních analýz v oblasti analýzy motorových paliv, ukázaly výsledky práce nové možnosti využití vybavení chemické laboratoře pro výzkum, vývoj, výuku i pro práce pro externí zadavatele.

Z výsledků práce vyplývá, že použité metody jsou vhodné pro aplikaci v praxi. Dosažené výsledky autor správně interpretuje. Grafická část práce vhodně dokumentuje jak možnosti použitého softwaru, tak dosažené výsledky; je zpracována pečlivě a přehledně.

Při hodnocení celkového přístupu diplomanta k tématu diplomové práce, zvoleného postupu řešení a použitých metod mohu konstatovat, že student vycházel ze systematické analýzy současného stavu poznání v oboru. Teoretické poznatky experimentálně ověřil a vhodně je aplikoval. Dosažené výsledky pokládám za dostatečně zdůvodněné.

Posluchač úspěšně zvládl principy, metodiku i konkrétní provedení všech měření. Výsledky, kterých ve své DP dosáhl, jsou přínosem především z metodického hlediska – mají význam pro rozvoj uvedených instrumentálních metod.

Celkově je předložená práce na dobré úrovni jak po stránce odborné, tak po stránce formální. Je v souladu s příslušnými normami, zákonnými ustanoveními a předpisy.

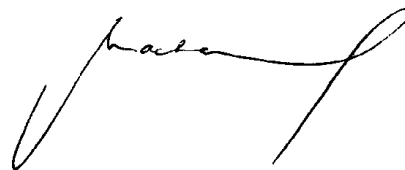
Vzhledem k tomu, že diplomant Bc. Jan Karel splnil všechny body zadání diplomové práce, použil vhodné metody řešení a prokázal jak odpovídající teoretické znalosti, tak schopnost a připravenost k experimentální práci, doporučuji DP k obhajobě a hodnotím ji známkou

**v ý b o r n ě .**

**Téma do diskuze:**

Uveďte, čím se zabývá chemometrie a jak lze rozdělit analytické postupy, které používá.

V České Třebové 15. 6. 2011



doc. RNDr. Jaroslava Machalíková, CSc.  
vedoucí diplomové práce