



Oponentní posudek na bakalářskou práci



Autor: Adam Studený
Název: Analytické metody vyšetřování požárů
Vedoucí: prof. RNDr. Karel Lemr, Ph.D.
Konzultant: Mgr. Lucie Borovcová, Ph.D.
Oponent: Mgr. Jiří Houšť

Popis bakalářské práce

Předkládaná bakalářská práce pana Adama Studeného se zabývá analytickými metodami vyšetřování požárů s konkrétním zaměřením na hmotnostní spektrometrii s použitím *sondy pro analýzu vzorku za atmosférického tlaku* (ASAP) jako ionizačního zdroje. Bakalářská práce se skládá z Úvodu, Teoretické části, Experimentální části, Výsledků a diskuze a Závěru. Dále nechybí seznam citací, zkratk a symbolů. Tato práce čítající celkem 49 stránek se opírá o 42 citací, obsahuje 39 obrázků a osm tabulek. Součástí práce jsou i Přílohy skládající se z pěti stránek a 12 obrázků.

V Teoretické části se autor zabývá charakteristikou a problematikou požárů s definováním základním pojmů. Následně je představena a stručně popsána paleta základních instrumentálních metod (spektrálních, separačních, termických) používaných při vyšetřování požárů. Samostatnou kapitolu tvoří hmotností spektrometrie s popisem základních ionizačních technik analytů. Důraz je kladen na používanou ionizační techniku ASAP.

Experimentální část je klasicky členěna. Autor uvádí všechny použité chemikálie, složení jednoduchých a směsných akceleračních, přístrojové vybavení, základní parametry nastavení iontového zdroje, úpravu analytů a celkem tři použité pracovní postupy.

V kapitole Výsledky a diskuze student nejprve interpretuje hmotnostní a fragmentační spektra jednoduchých (aceton, toluen, xyleny, hexan, ethanol, methanol, diethylether) a komplexních (Pe-Po, ředidlo, petrolej, nafta, benzín) akceleračních. Po získání těchto jsou dále analyzovány akcelerační z povrchu nespáleného i spáleného kousku tkaniny. Na závěr se autor snaží určit z hmotnostních spekter akcelerační použité na třech modelových vzorcích, které byly připraveny jinou osobou.

V Závěru autor hodnotí dosažené výsledky – proč nebylo možné získat hmotnostní spektrum hexanu a diethyletheru, jaké jsou přednosti a nedostatky použitého iontového zdroje, jak docílit lepší průkaznosti výsledků a jakým směrem by se mohly navazující studie na toto téma ubírat.

Připomínky k bakalářské práci

Celkový rozsah bakalářské práce a členění jednotlivých kapitol je více než přiměřené a odpovídá charakteru této závěrečné práce. Její kvalita je snížena gramatickými chybami, překlepy, chybějící interpunkcí, občasnou složitou větnou skladbou a nevhodným výběrem slov či slovosledem. Všechny tyto aspekty ztěžují snadnost čtení a jasnost výkladu*.

Mezi další formální a grafické prohřešky patří nejednotnost v zarovnání obrázků na střed (obr. 1, obr. 14), ve formátování a zpracování tabulek – např. otevřená a uzavřená struktura, použití kurzívy apod. Pro lepší přehlednost mají být tabulky a obrázky na jedné stránce,

např. osamocený řádek tab. VII na str. 31 a rozdělený obr. 39 na dvou stránkách, dále by bylo vhodné umístit každý akcelerant na samostatnou stránku (str. 24–32). Formátování citací, především publikací, není jednotné – ať už se jedná o pořadí křestního jména a příjmení, chybějící čísla daného *Volume* časopisů nebo jednoho uváděného DOI.

Teoretická část by mohla být doplněna (ne nutně) o statistiku výskytu žhářství a použitých akceleraantů v ČR a vývoj počtu článků zainteresovaných na toto téma.

V rámci kapitoly Experimentální část není jasné, jestli byl i druhý hmotnostní spektrometr (Xevo TQD) kalibrován pomocí vnitřního standardu kofeinu nebo jiné látky a jestli parametry pro ASAP uvedené v tab. III (str. 19) jsou platné pro měření na obou dvou hmotnostních spektrometrech. Určitě by bylo vhodné přidat i další informace, např. typ kolizního plynu a přesnost kalibrace. Zmínka o druhu použité tkaniny (staré laboratorní kalhoty) by měla být již v pracovním postupu B (str. 20).

Zcela nadbytečný je první odstavec v kapitole Výsledky a diskuze – tato informace patří do Úvodu nebo Závěru. Chybí jednotky u uváděných ztrát v textu (př. str. 23 – ztráta 16 a 28). Pro porovnání spekter získaných samotnou analýzou akceleraantů a jejich analýzou na nespálené tkanině by bylo vhodnější použít konkrétnější výraz než „v dobré shodě“ (str. 32).

Seznam zkratk je zbytečně dlouhý (lze vynechat zkratky EVA, PES, PP, PU, RTG), navíc pro úplnost neobsahuje zkratky ATD, DART, DESI, MS, Q-TOF.

* příklady chyb:

- str. 1: ...ve farmaceutické analýzy...
- str. 4: ..., které souhrnně mohou přispět k jejich **identifikaci**. **Spolu** s údaji např. z...
- str. 5: ...i v případě **vícero komponent**...
- str. 11: Při EI je fragmentace molekuly primárních iontů...
- str. 14: Hmotnostní spektrometrie většinou nepracuje samostatně, ale **spojeně** s jinými...
- str. 21: ..., která byla **potřísněn** akceleraantem. Takto... a následně **zanalyzována**.
- str. 31: ...lišící se o diferenci 14...
- str. 32: **Hmotnosntí** spektrum...
- str. 40: ...**byl** ve spektru **identifikován** ještě..., ...(v úvahu ještě **připadá** ředidlo...)
- str. 43: ...například testované materiály na další běžně se vyskytující v domácnostech...

Otázky k diskuzi

K předkládané bakalářské práci mám následující otázky k diskuzi:

1. Fragmentační spektra:

- a. Čemu odpovídá ztráta 28 Da ve fragmentačním spektru acetonu (str. 23, obr. 15B)? Jedná se o stejnou ztrátu jako v případě fragmentace diethyletheru (str. 27, obr. 21B; m/z 75,5 $\rightarrow$ m/z 47,5), Pe-Pa (str. 28, obr. 22B; m/z 95,4 $\rightarrow$ m/z 67,5), ředidla (str. 29, obr. 23B; m/z 105,4 $\rightarrow$ m/z 77,4) a petroleje (str. 30, obr. 24B; m/z 95,4 $\rightarrow$ m/z 67,5)?
- b. Je možné, aby ztráta 12 Da ve fragmentačním spektru Pe-Pa (str. 28, obr. 22B; m/z 67,5 $\rightarrow$ m/z 55,5) odpovídala ztrátě jednoho atomu uhlíku? Stejnou ztrátu lze pozorovat i ve fragmentačním spektru petroleje (str. 30, obr. 24B).
- c. Jaké sloučenině odpovídá pík o nejvyšší intenzitě m/z 105,4 ve fragmentačním spektru nafty (str. 31, obr. 25C)?

2. Dokázal by autor vymyslet jiný postup stanovení hexanu (s použitím hmotnostního spektrometru), který nebylo možné prokázat na skleněné kapiláře z důvodu silné těkavosti a nesnadné ionizace?
3. Je vhodné uvádět jako marker benzínu ion m/z 107,5? Tento ion je přítomen i v hmotnostním spektru nafty. Navíc stanovení tohoto iontu je v obou případech doprovázeno nejvyšší chybou (−9,3 ppm v tab. VII a −11,2 ppm v tab. VIII).
4. Proč autor nezměřil v záporném ASAP módu i hmotnostní spektrum methanolu, který rovněž obsahuje hydroxylovou skupinu schopnou deprotonace (jako v případě ethanolu)?

Celkový návrh

I přes formální, stylistické, jazykové a gramatické nedostatky je tato bakalářská práce zpracována v požadovaném rozsahu s více než dostatečným množstvím experimentálních dat. Celkový dojem z bakalářské práce poukazuje na autorův zájem o danou problematiku jak z hlediska zpracování teorie, tak i z prezentace, popisu a hodnocení získaných výsledků.

Předloženou bakalářskou práci doporučuji k obhajobě.

V Praze dne 13.5.2019

Mgr. Jiří Houšť
oponent bakalářské práce