

Studentka: Bc. Ivana Hnízdová
Předseda komise: prof. Mgr. Jaroslav Řeháček, Ph.D.
Vedoucí: RNDr. Josef Kapitán, Ph.D.
Oponent: RNDr. Václav Profant, Ph.D.
Hodnocení vedoucího: A
Hodnocení oponenta: A
Výsledné hodnocení: A

Název práce: Použití Ramanovy optické aktivity k prozkoumání konformace kyseliny askorbové (vitaminu C) a její interakce s rozpouštědlem

Průběh obhajoby:

Studentka prezentovala hlavní výsledky diplomové práce. Na úvod byly diskutovány vlastnosti a využití kyseliny askorbové a byl představen ROA spektrometr, na kterém proběhla měření různých vzorků s obsahem kyseliny askorbové resp. askorbátu sodného. Naměřená Ramanova a ROA spektra byla srovnána s vypočtenými spektry. Byly provedeny simulace zahrnující vliv rozpouštědla a molekulové dynamiky. Srovnání dat s teoretickými predikcemi umožnilo odhadnout procentuální zastoupení různých forem askorbátu sodného ve vzorcích. Výsledky jsou připravovány k publikaci v odborném časopise. Po ukončení prezentace byly přečteny posudky vedoucího práce a oponenta a studentka uspokojivě odpověděla na položené dotazy. Na základě posouzení práce, vypracovaných posudků a projevu studentky během prezentace a diskuse se komise shodla na výsledném hodnocení A.

Otázky:

- Byl pozorován vliv stárnutí vzorku na naměřená spektra? Jak byly vzorky skladovány?
- Jaký chemický proces způsobil nestabilitu a žloutnutí některých vzorků?
- Jaká je přesnost stanovení rozkladu experimentálního spektra do spekter vypočtených v Tabulce 6.8? Jakou metodou byl tento rozklad proveden?
- Byla proměřena koncentrační závislost Ramanových spekter? Můžete odhadnout kolik molekul vody připadá na jednu molekulu kys. askorbové při koncentraci 0,5M a 1,96M?