

Slečna Lydie Plačková vypracovala bakalářskou práci nazvanou Studium segmentové dynamiky vybraných fluorovaných methakrylátů pomocí NMR pevné fáze. Jak název práce částečně napovídá, jedná se experimentální práci zaměřenou na výzkum fyzikálně-chemických vlastností polymerních gelů v přítomnosti solí lithia. Tematiku práce považuji za velmi aktuální, neboť v současné době lithium-polymerní baterie patří mezi nejčastěji používané zdroje elektrické energie v osobních elektronických zařízeních. Jejich výhodou je nízká hmotnost, relativně vysoká kapacita, minimální samovybíjení a velká výkonnost. Další zvýšení jejich účinnosti a bezpečnosti patří k primárním úkolům při jejich vývoji.

Vlastní práce v rozsahu 36 stran je napsána přehledně a srozumitelně relativně s malým množstvím věcných a jazykových chyb. Dílo lze rozdělit do 3 hlavních kapitol: úvodní část se věnuje principům NMR spektroskopie, přičemž je poukázáno na nesnáze, které vznikají při měření NMR spekter v pevné fázi a technikám umožňujícím se těmto problémům vyvarovat. V prostřední stati jsou diskutovány fyzikální a chemické vlastnosti komponent používaných v lithium-polymerních bateriích a závěrečná část se zabývá autorčinými měřeními NMR spekter na ÚMCH v Praze. Autorka zde srovnávala 2 vzorky gelových polyelektrolytů o odlišném složení s cílem porovnat jejich vhodnost pro použití v bateriích. Je ukázáno, že speciální techniky, jakou je rotace pod magickým úhlem, vedou k výraznému zvýšení rozlišení spektra, díky čemuž bylo možné určit, že vzorek s vyšším obsahem kapalné fáze má větší vodivost.

K práci mám několik výhrad:

Úvod, který by objasňoval smysl práce, je poněkud netradičně zařazen až na počátku experimentální kapitoly na str. 22.

Ač je teoretickým základům NMR spektroskopie věnováno 15 stran, základní princip metody prakticky není v textu vysvětlen a Larmorova rezonanční frekvence je jen okrajově zmíněna v podkapitole o chemickém posunu.

Na str. 3 je jako příklad zvoleno jádro vodíku s nukleonovým číslem 2. Bylo by vhodnější nehovořit v navazujícím textu o atomu vodíku, ale o deuteriu.

na str. 7 místo "populační stav spinů" by bylo vhodnější použít formulaci "populace spinových hladin/stavů"

Na str. 9 nerozumím formulaci "Jako NMR spektrum označujeme závislost intenzity signálu na frekvenci elektromagnetického záření (dříve na indukci vnějšího magnetického pole)."

na téže straně chybí v rov. 8 definice některých veličin.

Na str. 16 je nesystematické používání českých a anglických zkratk - *a kol.* vs. *et al.* , navíc ještě špatně napsáno jako "at."

na str. 24 by bylo vhodnější Tab. 2 pojmenovat Podmínky měření než Parametry měřených jader

na str. 31 místo spektrum vodíku lépe ^1H spektrum

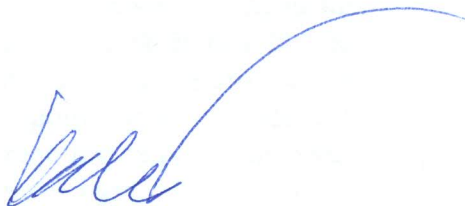
na str.33 místo "píky jsou více rozlišené" má být zřejmě spektrum má lepší rozlišení

Přes tyto připomínky považuji práci za zdařilou a doporučuji ji k obhajobě.

Otázky k diskusi:

1. Měřené vzorky jsou označeny F5 a F13. Má toto označení nějaký význam či je náhodně zvolené?
2. V závěru je zmíněno, že jeden ze vzorků má vyšší vodivost, aniž by byl tento fakt dále diskutován. Znamená to, že jeho složení je vhodnější pro použití v bateriích?
3. Izotop ${}^7\text{Li}$ má hodnotu jaderného spinu rovnou $3/2$ a nezanedbatelný kvadrupólový moment. Nebylo by vhodnější pro měření použít izotop ${}^6\text{Li}$, která má tento moment téměř zanedbatelný? Jaké komplikace obecně měření NMR spektrů jader s hodnotou jaderného spinu větší než $1/2$ přináší oproti jádrům se spinem $1/2$?
4. Jakým způsobem je v MAS experimentu dosažena orientace jader taková, aby odpovídala magickému úhlu?

V Českých Budějovicích 6.1.2014



doc Mgr. Martin Kabeláč, Ph.D.