



## Oponentní posudek bakalářské práce

<b>Autor/ka BP:</b>	<b>Pavel Jakubů</b>
<b>Název práce:</b>	<b>Aplikace strukturně příspěvkových metod na termodynamické vlastnosti vodných roztoků polyfunkčních organických látek</b>
<b>Oponent/ka:</b>	<b>Mgr. Martin Slavík, Ph.D.</b>

Hodnotící kritéria	Splňuje bez výhrad	Splňuje s drobnými výhradami	Splňuje s výhradami	Nesplňuje
<b>A. Obsahová</b>				
V práci jsou vymezeny základní a dílčí cíle, které jsou v koncepci práce patřičně rozpracovány. Cíle jsou adekvátně naplňovány.	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Práce splňuje cíle zadání.	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Studující využívá a kriticky vybírá primární a/nebo sekundární literaturu.	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Práce má vymezen předmět, je využito odpovídajících metodologických postupů.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Výstupy výzkumných částí jsou adekvátně syntetizovány a je o nich diskutováno.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
V práci je využita odborná terminologie a jsou vysvětleny hlavní pojmy.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
V práci jsou formulovány jasné závěry, které se vztahují ke koncepci práce a ke stanoveným cílům.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>B. Formální</b>				
Práce vykazuje standardní poznámkový aparát a jednotný způsob citací v rámci práce, je typograficky jednotná.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Studující dodržuje jazykovou normu, text je stylisticky jednotný.	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Text je soudržný, srozumitelný a argumentačně podložený.	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
<b>C. Přínos práce*</b>				
	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

### Slovní hodnocení práce:

Práce navazuje na článek: Sedlbauer, J.; Jakubu, P. Application of Group Additivity Approach to Polar and Polyfunctional Aqueous Solutes. *Industrial & Engineering Chemistry Research* 2008 47 (15), 5048-5062. Pro odhad vlivu příspěvků polárních funkčních skupin a jejich proximitních efektů k hodnotám standardních termodynamických veličin slouží vzájemné porovnání hodnot příspěvků vypočtených z různých typů sloučenin (polyfunkční nebo v rámci homologické řady).

Text obsahuje některé nepřesnosti a překlepy: s. 10 MG-metoda GC-metoda autorů Marrero a Gani – správně Marrero a Gani; s.13 2-pentanol – podle IUPAC správně pentan-2-ol; s. 20 standardní molární entalpie hydratace – lépe standardní molární hydratační entalpie; standardní chemický potenciál rozpuštěné látky (standardní parciální molární Gibbsova energie slučování) – nejedná se o slučovací veličinu, ty reprezentují rozdíl mezi standardní

veličinou látky v příslušném stavu a sumou standardních veličin jednotlivých prvků z nichž se látka skládá; limitní koeficienty aktivity (lépe aktivní), s. 30 1,2etandiol...

**Práce splňuje požadavky na udělení akademického titulu Bc.:**

**ANO**

**Práci doporučuji k obhajobě:**

**ANO**

**Návrh klasifikačního stupně:**

**velmi dobře**

**Náměty pro obhajobu:**

Čím si vysvětlujete zřetelně nižší hodnoty příspěvků k parciálnímu molárnímu objemu u skupin –OH a –COOH, které jsou vypočtené z prvního členu homologické řady?

Výše uvedené neplatí pro skupinu –NH<sub>2</sub>, čím by to mohlo být způsobené? (Grafy 4–6)

Datum: 22.01.2023

Podpis: \_\_\_\_\_