# U N I V E R Z I T A  H R A D E C  K R Á L O V É

Přírodovědecká fakulta Katedra fyziky

==========

# *Posudek vedoucího diplomové práce*

Název: **Program pro kvantitativní vyhodnocování Ramanových spekter**

Autor DP: **Mgr. Jakub Kulaviak**

Vedoucí DP: Mgr. Jan Loskot, Ph.D.

Oponentka DP: Mgr. Zuzana Malá, Ph.D.

**Stručná charakteristika:**

Autor se ve své diplomové práci (DP) věnuje Ramanově spektroskopii se zaměřením na softwarové zpracování Ramanových spekter. Práce má 54 stran a je rozčleněna do čtyř kapitol. Nedílnou součástí DP a hlavním přínosem autora je počítačový program pro zpracování Ramanových spekter (zdrojové kódy i spustitelná verze programu jsou volně dostupné online).

V teoretické části práce je uveden historický úvod do tématu, dále jsou zde popsány fyzikální principy Ramanovy spektroskopie a základní uspořádání Ramanova spektrometru. Teoretická část zahrnuje také příklady praktického využití Ramanovy spektroskopie v různých oborech lidské činnosti a popis hlavních úkonů při vyhodnocování spekter (korekce základní linie, výpočet parametrů spektrálních píků).

V praktické části autor navrhl a vytvořil program umožňující provádět předzpracování a vyhodnocování Ramanových spekter (konkrétně zejm. oříznutí spekter, odstranění fluorescenčního pozadí, výpočet výšek a ploch spektrálních píků, import a export spekter). Text praktické části DP zahrnuje zdůvodnění výběru programovacího jazyka (C#) a popis zvolené architektury programu a použitých softwarových technologií. Poslední kapitola je věnována popisu funkcí, které autorem vytvořený program nabízí.

**Hodnocení a návrh klasifikace**

Zvolené téma je vhodné pro autorovu studijní specializaci Fyzikální měření a modelování. Práce odpovídá zadání, je logicky uspořádána a je v ní patrný značný podíl tvůrčí činnosti autora. Autor prokázal schopnost samostatně a profesionálně navrhnout a vytvořit užitečný software, který nalezne uplatnění např. ve výzkumu prováděném na Katedře fyziky PřF UHK. Silnou stránkou programu je nejen algoritmus pro kvalitní předzpracování a vyhodnocení spektra, ale také možnost hromadného zpracování většího počtu spekter.

Z odborného hlediska má práce velmi dobrou úroveň. Pouze bych upozornil, že na str. 15 by bylo vhodné vysvětlit pojmy „polarizovatelnost“ a „vnitřní souřadnice molekuly“. Text DP je poměrně pečlivě zpracován, přestože se v něm vyskytuje několik typografických a jazykových chyb (např. v Poděkování autor použil formulaci „Také by jsem rád poděkoval …“). Práce má též několik formálních nedostatků. Zkratka „CCD“ je vysvětlena až na str. 18, přestože poprvé byla v textu použita už na předchozí straně. V některých částech textu, v nichž autor čerpal z literárních zdrojů, chybí odpovídající citace (např. na str. 13, 22). Způsob formátování referencí není zcela jednotný. Na druhou stranu, autor použil dostatečné množství vhodné odborné literatury v českém i anglickém jazyce.

Předložená práce **splňuje požadavky kladené na diplomové práce**, doporučuji ji tedy k obhajobě. Vzhledem ke značnému rozsahu a kvalitě odvedené práce navrhuji i přes uvedené výhrady **hodnocení stupněm B**.

V Hradci Králové 8. 7. 2024 Mgr. Jan Loskot, Ph.D.