

Oponentský posudek na diplomovou práci Bc. Martiny Piroutkové

Předložená diplomová práce Bc. Martiny Piroutkové C20508 z Katedry analytické chemie a studijního programu *N0531A30030 Hodnocení a analýzy potravin* shrnuje výsledky výzkumné práce multiprvkové analýzy 45 vzorků lišejníků z 15 lokalit Slovenska metodou ICP-MS s kvadrupólovým analyzátozem iontů a oktapólovou kolizně reakční celou ORS. V heliovém kolizním módu byla potlačena spektrální interference polyatomických iontů a bylo dosaženo přesné multielementární analýzy. Stanovení 55 prvků ve vzorku lišejníku *Xanthoria parietina* bylo počítačově zpracováno vícerozměrnými statistickými metodami PCA a MANOVA, a tak odhaleny vnitřní vztahy a souvislosti mezi lokalitami a prvky.

I. Aktuálnost zvoleného tématu

Téma diplomové práce vychází z výzkumu pracoviště, jež je součástí společného projektu mezinárodní spolupráce s Trnavskou univerzitou v Trnavě na Slovensku, kde česká strana nabídla špičkové přístrojové vybavení včetně zkušeností v instrumentaci a také dostatečnou znalost metod počítačové statistické analýzy vícerozměrných dat. Projekt je plánován na více let s cílem z hlediska časové a prostorové dynamiky 15 lokalit Slovenska monitorovat vybrané kovy ve složkách ekosystému v okolí skládky loužence v Seredi. Cílem diplomové práce bylo navrhnout analytickou metodu multielementární analýzy ve vzorcích lišejníku. Aktuálnost zvoleného tématu se jeví proto z hlediska analytické chemie a ekologie nesporná a publikačně atraktivní.

II. Konkrétní dosažené výsledky a nové poznatky

V rešeršní části mne zaujal výtečný přehled vlastností lišejníků, stejně jako masivní popis spektrální a nespektrální interference v ICP-MS a její potlačení matematickou korekcí.

V experimentální části musela studentka zvládnout experimentální strategii přípravy vzorku a měření zprvu na standardech a pak vzorcích lišejníků na špičkových přístrojích, zejména: a) mikrovlnného rozkladu Berghof Speedway Xpert, b) ICP-MS Agilent 7900 s ORS a UHMI, a to vše s vynikajícími pracovními podmínkami.

Ve výsledkové části mne zaujala řada důkazů věrohodnosti analytického stanovení, což je u nově zaváděné analytické metody kritérium prvořadé důležitosti. Sem patří **optimalizace parametrů nastavení ICP-MS** za účelem věrohodnosti simultánního stanovení tak velkého množství prvků (55). **Pravdivost** (čili návratnost jako těsnost souhlasu střední hodnoty obsahu standardu získané vůči deklarované výrobcem v %) a **preciznost** (za podmínek opakovatelnosti 1 a 30 dní) dávala na standardech výrobce variabilitu nižší než 11%. **LOD** a **LOQ** vystihují detekční schopnost systému u analýzy reálných vzorků, což vysoce podporuje věrohodnost analytického stanovení. **Graf komponentního skóre PCAS1-2** rozdělil lokality znečištění do 4 shluků. Přitom lokality Sereď a Párnica dominovaly ve PCAS2 a PCAS3. **Grafy komponentních vah PCAW1, PCAW2, PCAW3** rozdělily 55 prvků do tří zajímavých skupin. Protože ANOVA a MANOVA vyžadují normalitu rozdělení, bylo asymetrické rozdělení výběrů správně transformováno **dle Boxe a Coxe**. U lišejníku nebyly nalezeny **odlehle body**. Bylo dokázáno, že **zajímavé lokality znečištění** jsou pouze ve směru na sever a na jih od skládky v Seredi, zatímco znečištění se do širšího a vzdálenějšího okolí významně nešíří. Oceňuji,

že v popisných statistikách je vzhledem k asymetrickému rozdělení kladen důraz na **medián a kvantily** a využita Box-Coxova transformace primárních dat.

III. Zhodnocení úrovně zpracování diplomové práce

Po **obsahové stránce** má diplomová práce díky operování náročné instrumentace, ale také díky rigoróznímu chemometrickému vyhodnocení dat velice solidní úroveň, je psána přehledně stručným publikačním jazykem a na dnešní poměry studentů s překvapivě dobrou češtinou svého literárního slohu. Zřídka se totiž v diplomkách setkávám s tak experimentálně náročným tématem spojeným s rigorózním počítačovým vyhodnocením dat.

Po **formální stránce** jde o dobrou grafickou i textovou prezentaci výzkumné práce. Jedinou připomínku mám k obr. 14, 15, 16, 17, které by lépe diagnostikovaly expandované na A4 formát, a proto by měly být zvětšeny na prezentačních slidech u obhajoby.

Dotaz k obhajobě: Porovnejte metodu hlavních komponent s metodou analýzy shluků (např. Wardovou), bylo by možné tuto aplikovat na Box-Cox-transformovaná data znečištěného lišejníku?

IV. Závěr oponentského posudku

Diplomová práce má vynikající úroveň a po překladu stěžejní části do angličtiny je připravena k nabídnutí do prestižního impaktovaného časopisu, což se zřídka povede u každé diplomové práce. Diplomantka si zvolila náročnou školitelku s náročným tématem. Musela být hodně pilná a pracovitá, aby se jí povedl takovýto hezký a po odborné stránce náročný rukopis. Musela se také hodně soustředit, aby zvládla strategii obsluhy náročného přístroje ICP-MS a aby splnila všechny úkoly své školitelky, od které se toho myslím po všech stránkách hodně naučila. To totiž jasně a zřetelně vyzařuje z předloženého rukopisu diplomové práce. Dovoluji si proto navrhnout předsedovi komise pro obhajoby, aby dovolil přihlásit tuto vynikající diplomovou práci do soutěže o nejlepší diplomovou práci k ocenění děkana.

Diplomovou práci hodnotím známkou
výborně (A).