

Oponentský posudek na diplomovou práci
Analýza obsahu prvků v listech topolů metodou ICP-MS
Bc. Víta Hrušata

Předložená diplomová práce *Analýza obsahu prvků v listech topolů metodou ICP-MS* studenta Bc. Víta Hrušata C21410 z Katedry analytické chemie a studijního programu N0531A30028 *Analytická chemie* shrnuje výsledky stanovení 53 prvků v 96 reálných vzorcích listů a větviček topolu *Populus alba* při monitoringu znečištění 4 různých lokalit v Sereďské oblasti Slovenska metodou ICP-MS s kvadrupólovým analyzátozem iontů a oktapólovou kolizně reakční celou ORS4. V heliovém kolizním módu byly potlačeny spektrální interference polyatomických iontů a bylo dosaženo přesné multielementární analýzy. Stanovení bylo počítačově zpracováno vícerozměrnými statistickými metodami, a tak odhaleny vnitřní vztahy a souvislosti mezi lokalitami a prvky.

I. Aktuálnost zvoleného tématu

Téma diplomové práce vychází z mezinárodní spolupráce s Trnavskou univerzitou na Slovensku, kde česká strana nabídla špičkové přístrojové vybavení včetně zkušeností s instrumentací a také znalost metod počítačové statistické analýzy vícerozměrných dat. Cílem diplomové práce bylo navrhnout metodu multielementární analýzy vzorků listů a větviček topolů z oblasti Sereď. Aktuálnost zvoleného tématu se jeví proto z hlediska analytické chemie a ekologie nesporná a publikačně velmi atraktivní.

II. Konkrétní dosažené výsledky a nové poznatky

Rukopis je psán přehledně téměř učebnicovým stylem o navržené experimentální metodice a následném rigorózním zpracování naměřených dat na mezinárodně validovaném software STATISTICA a Matlab. Práce se jeví silnou v originalitě a novosti, a tím splňuje hlavní požadavky především náročnějších vědeckých časopisů, To bude nyní předmětem mého kritického posouzení:

V rešeršní části mne zaujal kriticky zpracovaný masivní literární přehled (267 citací) vlastností a klasifikace bioindikátorů, přípravy a zpracování rostlinných vzorků, i ICP-MS analýza včetně spektrální a nespektrální interference a jejího potlačení je zde pojata metodicky. Kriticky a přehledně je literární část o známé a dostupné metodologii přípravy rostlinných vzorků srozumitelně prezentována v šesti-stránkové Tabulce 1.

V experimentální části bylo třeba zvládnout strategii přípravy vzorku, optimalizaci a validaci analytického postupu a měření reálných vzorků na náročné instrumentaci. Mentálně nejobtížnější bylo vyextrahovat a porovnat z vícerozměrných naměřených dat metodami PCA, PCA-ANOVA a exploratorními grafy mediánů s radarovými grafy statisticky významné koncentrace míst skládky niklové huti proti vzdáleným kontrolním lokalitám Šala, Leopoldov. Je třeba podotknout, že vícerozměrná statistická analýza se na fakultě nevyučuje a přes značnou matematickou náročnost je bohužel věcí samostudia.

Ve výsledkové části mě zaujala řada důkazů věrohodnosti analytického stanovení, což je u nově zaváděné analytické metody kritérium prvořadé důležitosti. *Graf komponentního skóre PCA* rozdělil lokality znečištění do shluků. Přitom od lokality Sereď se lokality Šala s Leopoldovem odlišovaly. Názorně vypovídaly dvojné grafy, ve kterých se zřetelně průvodiče prvků dotýkaly lokalit odběru.

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**.

Otázka 1 Exploratorní diagramy mediánů (stejně jako radarové grafy) se lišily pro listy, větvičky A a B, což by bylo třeba vysvětlit.

Otázka 2 Přísný předpoklad PCA velí, že počet řádků by měl pětinašobně převyšovat počet sloupců, což bylo sice numericky laborováno ale není to v textu **Výsledky** a ani v **Závěru** komentováno.

III. Zhodnocení úrovně zpracování diplomové práce

Po **obsahové stránce** má diplomová práce vzhledem k účinnosti použité instrumentace, ale také díky rigoróznímu chemometrickému vyhodnocení dat solidní úroveň, je psána přehledně stručným publikačním jazykem. Zřídka se v diplomových pracích setkávám s tak experimentálně náročným tématem, a především spojeným s rigorózním počítačovým vyhodnocením vícerozměrných dat.

Po **formální stránce** jde o dobrou grafickou i textovou prezentaci výzkumné práce. Jedinou připomínku mám k obr. 21, 22, 23, které by lépe diagnostikovaly se shodnou x-ovou osou.

IV. Závěr oponentského posudku

Diplomová práce má vynikající úroveň a po překladu stěžejní části do angličtiny je připravena k nabídnutí do prestižního impaktovaného časopisu. Diplomant musel být hodně pilný a pracovitý, aby se mu povedl takovýto hezký a po odborné stránce náročný rukopis. Musel také nastudovat metody vícerozměrné statistické analýzy, což není zrovna snadné. Dále se musel hodně soustředit, aby zvládl strategii obsluhy náročného přístroje ICP-MS a splnil všechny úkoly. To totiž jasně a zřetelně vyzařuje z předloženého rukopisu diplomové práce.

Diplomovou práci hodnotím známkou
výborně (A).

V Pardubicích 17. května 2023

Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.