

Využití metody ICP-MS pro stanovení vlivu půdního aditiva na obsah prvků v pšenici

Předložená diplomová práce Bc. Lucie Jakobové vychází z projektu Trnavské univerzity a je zaměřena na analýzu obsahu prvků ve vybraných orgánech pšenice.

I. Aktuálnost zvoleného tématu z hlediska celosvětového poznání

Aplikace analytických metod s počítačovou analýzou dat se z hlediska vědeckého poznání ukazuje jako velmi nadějně téma. Tato studie má zhodnotit, zda navržený typ půdního aditiva, původně určený k ovlivnění vodního režimu v půdě, ovlivňuje obsah stanovovaných prvků v rostlinách pšenice. O vysoké aktuálnosti a užitečnosti navržené metodologie proto není sporu.

II. Zvolené metody zpracování a vlastní přínos diplomantky

K práci nemám vážnějších připomínek, uvedené komentáře jsou spíše náměty k diskusi, které by mohla u obhajoby diplomantka blíže vysvětlit či komentovat.

1. Úvod, str.9 obsahuje cíl diplomové práce, kde se autorka zaměřila na stanovení multi-prvkového profilu metodou ICP-MS a vyhodnocení dat počítačovou vícerozměrnou statistickou analýzou.

2. Teoretická část, str. 10 – 21 obsahuje především literární rešerši, která je přesvědčivě a přehledně zpracována s využitím citačního manažeru ZOTERO. Obsáhlý seznam odkazovaných 115 citací, svědčí o solidní informovanosti autorky o studované problematice. Rešerše přináší dokonalý přehled o přípravě vzorku zemědělské plodiny k analýze s využitím ICP-MS a ICP-OES metod a přehledně dokumentuje řešení spektrálních a nespektrálních interferencí ICP-MS analýzy v rutinní praxi.

3. Experimentální část, str. 22 – 33: Práce byla vypracována na výtečně přístrojově a softwarově vybaveném pracovišti. Přesvědčivé výsledky jsou úměrné vynaloženým nákladům na odevzdanou výzkumnou práci. Strategie experimentu a provedení analýz svědčí o vysoké úrovni analytické laboratoře a objasňuje, proč se slovenské pracoviště obrátilo právě na zdejší laboratoř. Doufám, že zajímavé výsledky budou uveřejněny ve významném impaktovaném časopise.

4. Výsledky a diskuse, str. 34 – 55: V nejdůležitější části diplomové práce je ve výsledcích řada zajímavých návrhů k počítačové analýze experimentálních dat, které vysoko hodnotím a jak jsem pochopil z literární části, nebyly zatím ostatními autory v oboru příliš využívány. Zaujala mne také vynikající preciznost analytického stanovení, které dokládá Tabulka 9 a dále např. dosažené meze stanovitelnosti použité analytické metody, které byly často lepší, než uvádí konkurence v literatuře. V analýze reálných vzorků jsou v práci vyčíslovány průměry. Přimlouval bych se za věrohodnější medián, nebo ještě lépe za retransformovaný průměr po Box-Coxově transformaci nebo Hornův odhad pivotů u malých výběrů.

Námět k diskusi č. 1: *Při vyčíslení míry polohy u výběrů s asymetrií rozdělení a heteroskedasticitou v datech se výhodně využívá transformace dat. Kdy je dle vašeho názoru nutné použít transformaci dat a jak zvolíte nejlepší druh transformace?*

V práci byla správně zvolena MANOVA před opakovanou ANOVA. Grafy PCAS na obr. 16 přesvědčivě ukazují na rozdílné obsahy prvků v orgánech pšenice, zatímco slovenské aditivum nemá významný vliv na obsah prvků v pšenici. Metodou NCA bylo úspěšně dokázáno na obr. 17, že pouze 29 prvků diskriminuje orgány pšenice.

Námět k diskusi č. 2: V prezentaci slidů u obhajoby doporučuji nepřehledný biplot na obr. 18 rozdělit na dva obrázky pod sebou, první graf vah PCAW a druhý graf skóre PCAS.

Námět k diskusi č. 3: V prezentaci slidů u obhajoby doporučuji nečitelný obr. 20 zvětšit, aby bylo možné lépe posuzovat koncentrace vybraných prvků. Stejná připomínka platí i pro radarové mnohoúhelníky na obr. 21, jsou totiž obtížně čitelné.

III. Úroveň zpracování diplomové práce

Po *obsahové stránce* diplomová práce prozrazuje, že jmenovaná je pečlivou experimentátorkou se zkušeností s náročnějším počítačovým vyhodnocením vícerozměrných dat. Rukopis je psán přehledně stručným publikačním jazykem a bude jenom k doporučení čerpat z něho jako z učebnice před použitím vícerozměrné statistické analýzy v biologickém či analytickém výzkumu. Z matematického hlediska a statistické terminologie jsou užitá značení správná a terminologie nezborcená.

Po *formální stránce* je práce přehledně, především matematicky správně naformulována. Autorka prokazuje, že skvělá forma včetně grafiky jenom umocňuje obsah. Názorné a samo-objasňující jsou všechny obrázky. Barevné nadpisy a barevné rozlišení v grafech je význačným pomocníkem při četbě náročného textu.

IV. Význam pro praxi a další rozvoj vědy

Mezi významnými závěry určitě objevné diplomové práce je třeba zdůraznit, že ICP-MS analýza zde umožňuje stanovení až 54 prvků bez interferencí. Tak velký počet prvků v rostlinném materiálu nebyl dosud v literatuře publikován. Vyhodnocení prvkového profilu provedly vybrané metody vícerozměrné statistické analýzy PCA, PCA-ANOVA, NCA. Přes rizikovou oblast těžkých kovů byly typické prvky (Ni, Cd a Pb) v zrně pšenice pro lokalitu Sereď v normě, což je optimistický závěr pro slovenského zadavatele.

Předložená diplomová práce je užitečná pro společenskou praxi a má proto nesporný význam. Řeší ryze praktické biologické a analyticko-chemické téma, správně užívá počítačových metod vícerozměrné statistické analýzy dat. Data jsou zpracována velice pečlivě s využitím moderního diagnostického software (MATLAB 2023, STATISTICA 14). Práce je na dobré úrovni, zpracování dat je pojato náročně a dosažené výsledky výstavby vícerozměrného modelu jsou proto přesvědčivé.

V. Závěr oponentského posudku

Konstatuji, že oponovaná diplomová práce plně vyhovuje požadavkům §47, vyhlášky č. 111/1998 Sbírky, dokumentuje dostatečnou vědeckou kvalifikaci diplomantky a prokazuje dostatečnou tvůrčí schopnost v dané oblasti výzkumu, a proto splňuje požadavky standardně kladené na diplomové práce v tomto oboru. Práce má navíc význam pro rozvoj analytického a zemědělského výzkumu a hodnotím ji jednoznačně známkou

Výborně (A).

V Pardubicích 20. května 2024

Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc., Emeritus
Katedra analytické chemie
Univerzita Pardubice,
532 10 Pardubice