



## Posudek vedoucího diplomové práce

Název tématu: Nové možnosti odstranění interference matrice při multielementární analýze reálných vzorků metodou ICP-TOF-MS.

Autor: Bc. Tereza Šídová

Studijní obor: Hodnocení a analýza potravin

Diplomová práce byla věnována možnosti odstranění spektrálních interferencí pocházejících od polyatomických sloučenin síry uplatňujících se při reálné multielementární analýze kyseliny sírové metodou hmotnostní spektrometrie s ionizací v indukčně vázaném plazmatu na spektrometru s průletovým analyzátozem s ortogonální akcelerací iontů (oTOF-ICP-MS). Pro tento účel byl navržen dusičnan barnatý jako chemický modifikátor matrice, s jehož pomocí dochází k odstranění síranů ze vzorku ve formě sraženiny síranu barnatého. Nově navržený způsob nabízí jednoduchou, rychlou a ekonomicky výhodnou alternativu ke stávajícím postupům využívajícím např. kolizně-reakčních cel, drahé instrumentace s vysokým rozlišením, nebo matematických korekcí, které selhávají zejména při stanovení velice nízkých koncentrací analytu.

Teoretická část práce byla věnována problematice interference matrice v ICP-MS a možnostem jejího odstranění. V experimentální části byl zpracován přehled použité instrumentace, uveden seznam použitých chemikálií, analyzovaných vzorků, postup přípravy roztoků a vzorků a shrnuty optimalizované parametry měření. Ve výsledkové části byl studován a kvantifikován vliv síry na stanovení vybraných elementů, resp. izotopických iontů a pro kompenzaci spektrální interference navrženo použití modifikátoru matrice. Z výsledků je zřejmé, že navržený postup přináší řešení pro stanovení Ti a Zn na hmotách  $m/z$  46, 48, 49, resp. 64. Stanovení obou prvků v kyselině sírové není za běžných podmínek na instrumentaci bez vysokého rozlišení možné provést. Na druhou stranu je hlavní nevýhodou navrženého postupu riziko spojené s kontaminací spektrometru baryem, vznik izotopických iontů  $^{67-68}\text{Ba}^{++}$ ,  $^{130-138}\text{Ba}^+$ , či např.  $^{134}\text{Ba}^{16}\text{O}^+$ ,  $^{134}\text{Ba}^{14}\text{N}^+$  a  $^{136}\text{Ba}^{16}\text{O}^1\text{H}^+$ . Každou z uvedených nevýhod je však možné s úspěchem řešit. Jedná se zejména o použití odpovídajícího množství dusičnanu barnatého a vhodně nastavený rozsah „smart gate“. Navržena byla metoda pro simultánní stanovení 27 prvků v kyselině sírové. Správnost metody byla ověřena pomocí analytických návratností. Určeny byly dále přesnost a analytické charakteristiky metody, které byly porovnány s hodnotami publikovanými pro dříve navržené postupy. V závěru práce byly shrnuty dosažené výsledky, uvedeny výhody a nevýhody navrženého přístupu.

Po formální stránce je diplomová práce psána přehledně a srozumitelně, obsahuje však řadu především formálních chyb a překlepů, které zbytečně snižují její úroveň. Diplomantka prokázala experimentální zručnost a přistupovala k řešení všech dílčích úkolů diplomové práce zodpovědně a do značné míry samostatně. Výsledky získané v průběhu řešení diplomové práce představují zcela nové poznatky v oblasti ICP-MS analýzy.

Jelikož Bc. Tereza Šídová splnila zadání své diplomové práce, doporučuji práci k obhajobě a hodnotím ji známkou:

**Výborně (-m).**

Ing. Lenka Husáková, Ph.D.

V Pardubicích 27. 5. 2013