



## Posudek oponenta diplomové práce

Název práce: Bioakumulace kontrastních látek na bázi gadolinia v zelené řase

Autor: Bc. Klára Šafaříková

Studijní obor: Bioanalytik

Předložená diplomová práce je věnována studiu akumulace kontrastních látek na bázi gadolinia a dusičnanu gadolinitého v zelené řase druhu *Chlorella kessleri* pro účely potencionálního využití při snížení vstupu antropogenního Gd do životního prostředí, kam se dostává z odpadních vod nemocnic, které nejsou dostatečně čištěny v čistírnách odpadních vod. Využití biosorpce a bioakumulace řasy rodu *Chlorella* pro výše uvedené účely je snadno dostupné, efektivní a vykazuje nízké provozní náklady.

Teoretická část práce je soustředěna na popis mechanismu ukládání cizorodých látek v zelené řase, podává přehled současného stavu analýzy gadolinia a ostatních prvků vzácných zemin se zaměřením na analytické metody umožňující stanovení celkové koncentrace, ale i koncentrace jednotlivých forem analytu. V experimentální části je zpracován přehled použité instrumentace, uveden seznam použitých chemikálií, analyzovaných vzorků, postup přípravy vzorků a uvedeny optimalizované parametry měření. V kapitole výsledky a diskuze jsou zachyceny optimalizace vyvíjených postupů. Navrženy byly vhodné podmínky postupu přípravy řas k analýze. Optimalizovány byly podmínky analýzy Gd metodou hmotnostní spektrometrie s ionizací v indukčně vázaném plazmatu a průletovým analyzátozem s ortogonální akcelerací iontů (oTOF-ICP-MS) ve vzorcích gadolнием obohacených řas s ohledem na sledované koncentrační rozmezí a vlivy matrice. Pozornost byla věnována možnosti využití Rh jako porovnávacího prvku pro kompenzaci nespektrální interference. Přesnost a preciznost stanovení byly ověřeny na základě analýzy obohaceného certifikovaného referenčního materiálu zelené řasy METRANAL<sup>®</sup> 8. Pro vyhodnocení akumulačních pokusů byl počítán biokoncentrační faktor definovaný jako poměr mezi koncentrací Gd v řase a zbytkovou koncentrací v roztoku a bioakumulační efekt udávající procentuální podíl naakumulovaného množství analytu v řase. Získané výsledky poukazují na velmi dobrou schopnost řas druhu *Chlorella kessleri* akumulovat sloučeniny gadolinia v různých formách. V závěru práce jsou shrnuty dosažené výsledky, zhodnoceny možnosti využití řas pro potřeby reálné praxe v procesu čištění vod a nastíněny možnosti pro další navazující studie.

K práci mám zejména následující připomínky:

- [1] Anotace: Použitý spektrometr není vybaven průletovým detektorem, ale průletovým analyzátozem iontů!
- [2] Str. 18–28: V kapitole 1.3 je soustředěna obsáhlá část textu mapující problematiku stanovení prvků vzácných zemin za využití celé řady analytických metod. Uvedené principy analytických metod jsou podle mého názoru obecně známé a jejich uvádění zde je nadbytečné.
- [3] Str. 21–22: Separace analytu od interferentu na principu diskriminace kinetické energie či hmotnosti pomocí tzv. kolizně-reakčních cel je možná pouze u instrumentace s kvadrupólovým analyzátozem a není tedy univerzálním řešením pro potlačení spektrálních vlivů při ICP-MS analýze.



- [4] Str. 22 a dále v textu: Namísto termínu interní standard by měl být použit termín porovnávací prvek.
- [5] Str. 56, kap. 2.4.3 a kap. 2.4.4: rozpuštěním 0.0287 g  $\text{Gd}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  vznikne po doplnění na celkový objem 100 mL roztok o koncentraci  $100 \text{ mg L}^{-1}$ , nikoli  $100 \mu\text{g L}^{-1}$ . Od pipetováním 125  $\mu\text{L}$  roztoku o koncentraci  $78.62 \text{ g L}^{-1}$  do odměrné banky objemu 100 mL bude koncentrace výsledného roztoku po doplnění na definovaný objem deionizovanou vodou  $98.3 \text{ mg L}^{-1}$ , nikoli  $100 \text{ mg L}^{-1}$ .
- [6] Str. 57, kap. 2.4.5: Chemikálie obsažené v tabulce 4 nejsou uvedeny v seznamu použitých chemikálií, chybí údaje o čistotě a výrobcích.
- [7] Str. 60, kap. 2.8: Uvedené rozlišení spektrometru vyjádřené pro izotop  $^{238}\text{U}^+$  je bezrozměrným číslem a není udáváno v countech!
- [8] Str. 60, kap. 2.8: Způsob určení hodnot detekčního limitu na základě formulace uvedené na str. 60 není dostatečně výstižný. Detekční schopnost uvedeného spektrometru pro stanovení vybraných izotopů  $^{156}\text{Gd}^+$ ,  $^{158}\text{Gd}^+$ ,  $^{160}\text{Gd}^+$  se pohybuje typicky na úrovni desetin nanogramů na litr, koncentrace zvoleného standardu ( $0.1 \mu\text{g L}^{-1}$ ) pro určení detekčního limitu je podle mého názoru zbytečně vysoká a zkresluje skutečnou detekční schopnost použitého spektrometru. Hodnoty koncentrace Gd v mineralizačním blanku, který je vhodný pro určení detekčního limitu navržené metody, jsou uvedeny až na str. 65 v tabulce 8. Nicméně hodnoty vychází pouze z výsledků 3 opakování. Bylo by rovněž přehlednější problematiku diskutovat na jednom místě v textu. Zajímavé by bylo také porovnat dosažené výsledky s hodnotami detekčního limitu určeného v souladu s doporučením komise IUPAC.
- [9] Str. 61, tabulka 7: Izotop  $^{158}\text{Gd}^+$  má oproti izotopu  $^{156}\text{Gd}^+$  vyšší přirozené zastoupení a lze pro něj očekávat nižší hodnotu detekčního limitu. Výsledky v tabulce 7 však tuto skutečnost nepotvrzují. Jaké byly hodnoty detekčního limitu vypočtené softwarem spektrometru GBC Optimass 8000 na základě analýzy kalibračních standardů? Pro izotop  $^{160}\text{Gd}^+$  existuje teoretická možnost monoizotopické spektrální interference izotopu  $^{160}\text{Dy}^+$ , byla tato interference při reálné analýze pozorována?
- [10] Str. 61, tabulka 6: Proč bylo při vlastní analýze metodou oTOF-ICP-MS použito pouze 3 opakování? Použití vyššího počtu bezprostředně po sobě následujících analýz by jistě do značné míry omezilo problémy spojené s pozorováním vyšších hodnot RSD, diskutovaných v textu na straně 63 a přičítaných nestabilitě přístroje a fluktuaci signálu.
- [11] Str. 62–65, kap. 3.1: V tabulce 8 by bylo lépe namísto hodnoty směrodatného odchytky výsledku uvádět rozšířené nejistoty, určené jako součin směrodatné odchytky opakovatelnosti ( $n = 3$ ) a koeficientu rozšíření ( $k = 2$ ), což pro normální rozdělení odpovídá pravděpodobnosti pokrytí 95 %. Jsou hodnoty RSD (%) uvedené v tabulce 8 mírou preciznosti navržené metody?

Závěrem je možné konstatovat, že diplomová práce je zdařilá a po obsahové i formální stránce splňuje všechna kritéria na tyto práce kladené. Shromážděné poznatky mohou být užitečné pro případné navazující studie věnující se nejen stanovení celkové koncentrace Gd, ale např. i speciální analýze komplexů Gd. Takové výsledky pak mohou sloužit např. ke studiu chování komplexů Gd v procesu čištění odpadních vod a objasnění souvislostí a příčin tzv. pozitivní gadoliniové anomálie. Jelikož Bc. Klára Šafaříková splnila všechny body zadání své diplomové práce, doporučuji práci k obhajobě a hodnotím ji známkou:

**Výborně -m.**

V Pardubicích 25. 5. 2016

Ing. Lenka Husáková, Ph.D.