

## OPONENTNÍ POSUDEK DISERTAČNÍ PRÁCE

Autor práce: Ing. Jakub Šulc

Název práce: Extrakční metody přípravy vzorků pro analýzu komplexních matic

Oponent: Ing. Veronika Škeříková, Ph.D.

Pracoviště oponenta: Ústav analytické chemie, Fakulta chemicko-inženýrská, VŠCHT v Praze

K posouzení mi byla předložena disertační práce s názvem „Extrakční metody přípravy vzorků pro analýzu komplexních matic“ v rozsahu 115 stránek textu, včetně čtyř příloh, použitých zdrojů a seznamu zkratk. Práce je rozdělena do šesti kapitol, a to včetně úvodu a závěru. Členění svojí strukturou odpovídá požadavkům kladeným na vědecké práce.

Svou práci doktorand formálně rozdělil na dvě části. V první části se věnuje teoretickým základům, druhá část je pak věnována popisu jednotlivých publikací, na jejichž tvorbě se podílel.

### **Aktuálnost daného tématu**

Doktorand zpracoval přehled literatury týkající se problematiky úpravy vzorku. V literární rešerši, která čítá 76 odkazů, se věnuje se jak klasickým metodám, tak hlavně extrakčním technikám, a to převážně na bázi kapalně a tuhé fáze. Doktorand zde shrnul aktuální poznatky o současném stavu problematiky, vymezil se vůči stávajícím poznatkům a řešením a prokázal prvek novosti a aktuálnosti daného tématu.

### **Metody zpracování**

Pro dosažení cíle doktorand využil následující instrumentální metody: mikroextrakce tuhou fází z plynné fáze nad vzorkem, plynová chromatografie ve spojení hmotnostním detektorem a s plamenově ionizačním detektorem, mikroextrakce vodným dvoufázovým systémem v kombinaci s kapalinovou chromatografií ve spojení s detektorem diodového pole. Samozřejmostí bylo i použití statistických metod, a to jak ve fázi plánování experimentu (design experiment), tak i při zpracování výsledků.

Doktorand zvoleným metodám věnoval dostatečný prostor, podrobně je specifikoval a teoreticky popsal.

### **Cíle práce**

Doktorand stanovil následující cíle práce: Identifikovat jednotlivé sloučeniny v profilu těkavých látek z různých vzorků dřev získaných pomocí SPME-GC-MS; Použít získané profily jako „fingerprint“ pro rozlišení původu modřínového dřeva bez potřeby předchozí identifikace jednotlivých látek; Poskytnout informace o roli a přínosu iontových kapalin v kompozitních materiálech, charakterizovat jednotlivé skupiny kompozitních materiálů a shrnout jejich zastoupení; Optimalizovat mikroextrakční techniku založenou na vodném dvoufázovém systému a aplikovat ji při stanovení produktů denní potřeby v odpadních vodách pomocí LC.

Mohu konstatovat, že doktorand cíle disertační práce splnil.

### **Výsledky disertační práce**

V první části doktorand vytvořil metodu pro extrakci, analýzu a identifikaci těkavých látek ve dřevě, kterou následně úspěšně aplikoval na analýzu těkavých látek v modříněch různého původu. Vzhledem k velkému počtu parametrů, které bylo možné optimalizovat pro nalezení vhodných podmínek extrakce VOC, doktorand vhodně použil „centrální kompozitní systém“, který vše zredukoval na 12 experimentů. Jednotlivé parametry byly optimalizovány z hlediska nejvyššího počtu identifikovaných látek. Pomocí optimalizované metody HS-SPME se podařilo doktorandovi identifikovat ve vzorcích celkem 185 těkavých látek.

Metodu dále aplikoval na analýzu 82 vzorků modřínového dřeva původem z Evropy a ze Sibiře. S použitím statistické metody OPLS (Ortogonalní projekce do latentních struktur) aplikované na aromaprofilu dřev se mu podařilo rozdělit vzorky podle jejich původu.

Problematika iontových kapalin v kompozitních materiálech doktorand zpracoval formou obsáhlého review.

V poslední části se doktorand věnoval nalezení vhodného složení vodného dvoufázového extrakčního a prekoncentračního systému. Kombinaci cholin chloridu jako extrakční fáze a hydrogenfosforečnanu draselného jako vysolovacího prvku ve vodě jako hlavní komponentě použil doktorand k extrakci 9 produktů denní potřeby z odpadních vod s jejich následnou separací pomocí HPLC s detektorem diodového pole.

Uvedené výsledky disertační práce jsou dostatečně podložené a průkazné. Hlavním přínosem disertační práce bylo vytvoření metody pro určení aromaprofilu dřeva, na jehož základě by bylo možné zjistit jeho původ, a také metody pro stanovení produktů denní potřeby ve vzorcích odpadních vod.

### **Formální náležitosti**

V práci jsou citovány aktuální zdroje vztahující se k tématu a také vlastní publikace doktoranda. Celkově je formální a jazyková úroveň práce dobrá, množství překlepů a chyb odpovídá rozsahu práce.

### **Závěr**

Doktorand ve své práci vykonal velké množství experimentů, přičemž prokázal schopnost využít teoretické znalosti a aplikovat je na problémy praxe. Doktorand projevil tvůrčí myšlení a schopnost systematické práce.

Na základě předložené disertační práce navrhuji doktorandovi, po úspěšné obhajobě, udělit vědecko-akademické hodnosti doktor ve zkratce Ph.D.

### **Otázky**

1. Na str. 41 není v legendě u obou obrázků uvedeno, která barva odpovídá Sibiřskému a Evropskému modřínu.
2. Z jak starých stromů byly získané vzorky dřeva? Byly všechny získány v jednom časovém období? Byly odebrány po nebo přes letokruhy?
3. Dovedete si představit vytvoření databáze aromaprofilů stromů, na jejímž základě by bylo možné odhalit falšování původu dřeva?

***Posudek na disertační práci Ing. Jakuba Šulce “Extrakční metody přípravy vzorků pro analýzu komplexních matic”.***

Předložená práce se zabývá studiem využití extrakčních metod pro přípravu vzorků. Z pohledu analytické chemie se jedná o neodmyslitelný krok při analýze komplexních (biologických) matic/vzorků – příprava vzorků je kruciólním postupem, který rozhoduje o úspěšnosti celého analytického postupu. I proto považuji předloženou disertační práci za vysoce aktuální. K vlastním analýzám doktorand použil množství moderních analytických metod.

Disertační práce je založena na celkem 4 publikacích v prestižních mezinárodních vědeckých časopisech, v jednom případě je disertant prvním autorem. Je zřejmé, že výsledky prošly přísným recenzním řízením a publikované výsledky jsou na vysoké úrovni.

Práce je přehledně členěna. Cíle práce jsou jasně formulované. Teoretická část je přiměřeně rozsáhlá a informativní, podává dostatečně podrobný přehled o studované problematice a využívaných extrakčních metodách. Použité metody jsou dostatečně popsány. Výsledková („praktická“) část přiměřeně shrnuje předložené práce. V Závěru bych uvítal zhodnocení/shrnutí Cílů práce – odpovídající bodům v nich uvedených.

Měl bych několik menších připomínek k práci:

V celé práci je patrná určitá publikační nezkušenost autora, některé formulace v češtině jsou neobratné – například str. 11: „Iontové kapaliny neustále získávají na své popularitě“ (lépe je jejich využití, nejedná se o popularitu politiků apod.), str. 12 „ve snaze udobřit si životní prostředí“ (s životním prostředím se asi moc nedohovoříte ani neudobříte...). Ovšem občas méně zdařilé formulace nemají vliv na celkový vědecký přínos předložené práce.


Měl bych i námět k diskusi:

- V publikaci 2 (o rozlišení původu modřínového dřeva) autoři uvádějí, že se jedná u multifaktoriální ovlivnění složení (životní prostředí apod.), ale při znalosti těchto rozdílných faktorů by se předložená metoda mohla použít například pro certifikace dřeva. Právě tímto směrem mám dotaz: pokusili se autoři dále rozpracovat metodu a identifikovat více faktorů s cílem identifikace místa původu nebo i druhu dřeviny?

Závěrem bych chtěl zdůraznit, že k disertační práci nemám podstatné připomínky. Mohu tedy konstatovat, že uchazeč předložil velmi kvalitní práci, která je podložena výraznými vědeckými (publikačními) výsledky.

Konstatuji tedy, že disertant splnil požadavky standardně kladené na disertační práci v oboru, prokázal schopnost tvůrčí vědecké práce a doporučuji jeho práci podstoupit dále do řízení vedoucí k udělení vědecké hodnosti PhD.

V Praze dne 16. listopadu 2021

  
prof. Ing. Ivan Mikšík, DrSc.  
Fyziologický ústav AV ČR, v.v.i.  
Vídeňská 1083  
14220 Praha 4