

Oponentský posudek disertační práce

Ing. Jakub Klus

Předložená disertační práce nazvaná „*Vývoj algoritmu pro automatickou charakterizaci vzorku na základě dat získaných spektroskopií laserem indukovaného plazmatu (LIBS)*“ řeší velmi aktuální problematiku a její téma je plně v kontextu nejnovějších vývojových trendů v oblasti LIBS spektrometrie. Práce se skládá ze tří významných částí.

V první části je zpracován přehled teoretických základů spektroskopie laserem indukovaného plazmatu. Jedná se o poměrně široké téma a zvolené členění na kapitoly a podkapitoly je logické a správně zvolené. Horší už je situace v případě obsahu některých podkapitol, které obsahují příliš velký počet nepřesností nebo nejasných formulací. Podrobněji jsem popsal ty nejzávažnější níže, v připomínkách k vlastní práci.

Druhá část je věnována popisu vybraných matematických metod využívaných nejčastěji pro automatickou charakterizaci dat získaných metodou LIBS. Tato kapitole je kvalitně zpracována a nemám k ní zásadních připomínek. Kladně hodnotím také závěr této kapitoly, který jasně poukazuje i na případná úskalí techniky automatické charakterizace založené na statistických metodách. Správně konstatuje, že tyto techniky jsou v současné podobě výhodně použitelné zejména jako podpůrný prostředek při využití konvenčních metod. Umožňují rychlejší optimalizaci metod, lepší diagnostiku problémů a zejména významné zkrácení procesu vývoje LIBS metody.

Třetí část pak představuje souhrn praktických aplikací metod popsaných v druhé části disertace. Kapitola vychází z velmi kvalitního souboru publikací, na kterých se autor podílel. Tato část práce je dělena do sedmi kapitol, šest z nich vychází z již publikovaných prací, poslední pak z prezentace na konferenci EMSLIB 2017. Každá kapitola stručně popisuje motivaci dané práce a získané výsledky. Na závěr je pak vždy uvedeno stručné kritické zhodnocení získaných výsledků. Ty osobně považuji za nejcennější část práce, v řadě případů přináší opravdu velmi užitečné informace, které posouvají obor LIBS kupředu. Tuto kapitolu považuji za nej kvalitnější část práce a vysoce oceňuji schopnost autora kriticky a výstižně zhodnotit získané výsledky. To bývá v poslední době velkým problémem řady disertačních prací.

Připomínky k vlastní práci se vesměs týkají úvodu a první části. V úvodu na str. 1 autor uvádí, že srovnatelné metody atomové emisní spektrometrie jako jsou optická nebo hmotnostní spektroskopie s buzením v indukčně vázaném plazmatu vyžadují složitou přípravu vzorku spočívající v jeho rozpuštění. Toto není vždy pravda, spojení těchto technik s laserovou ablací nebo elektrotermickým vypařováním vzorku eliminuje tento problém a například technika LA-ICP-MS je konkurenčně-komplementární technikou k metodě LIBS.

Str. 36 Kapitola 4.4.1 Popis tvorby kalibrační křivky u ICP „vzorek je rozpuštěn a změny koncentrace je následně dosaženo přidáním nosného média v různých poměrech“ se mi zdá zavádějícím. U ICP je běžná kalibrace na vodné kalibrační roztoky připravené ředěním standardů, případně na matričně podobné vzorky, kdy standardy obsahují hlavní složku matrice. To je hlavní výhodou techniky ICP a důvodem toho, proč je tato technika tak široce používána. Nevýhodou je nutnost rozpouštění vzorku.

Str. 37 první odstavec. Kvalitu kalibrační křivky nepopisuje Limita detekce. Ta popisuje spíše kvalitu „optimalizace“ metody a detekční schopnost metody. Kvalita kalibrační křivky je popsána statistickými veličinami, jako je například konfidenční interval a podobně. Kvalitu vlastní kvantitativní metody pak popisuje řada dalších parametrů, jako je správnost výsledků ověřená na referenčních materiálech nebo dlouhodobá stabilita výsledků.

Předložená práce řeší velmi aktuální téma a je plně v kontextu s aktuálními trendy v oboru. Zvolené postupy a řešení problematiky považuji za správné a konstatuji, že disertační práce plně splnila zadané cíle. Je také zcela nesporné, že doktorand měl významný a zcela konkrétní přínos při tvorbě publikací, ze kterých práce vychází. Získané výsledky mají významné uplatnění při rozvoji techniky LIBS spektrometrie a posouvají vědní obor kupředu.

I přes výše uvedené připomínky hodnotím předloženou práci jako kvalitní, zejména s ohledem na třetí část práce, která přináší skutečně podstatné a v praxi využitelné výsledky, včetně jejich kritického zhodnocení.

Práce plně splňuje požadavky na doktorskou disertační práci a **doporučuji udělení akademického titulu PhD.**

Předložené teze splňují všechny požadavky.

V Lázních Bohdaneč 14.11. 2017



Doc. Ing. Tomáš Černohorský, CSc.
Ústav environmentálního a chemického inženýrství
Fakulta chemicko-technologická
Univerzita Pardubice
e-mail: tomas.cernohorsky@upce.cz