

## Stanovisko školitele k disertační práci a vyjádření ke studentovi:

### Mgr. Michal Lacko „Studium reakcí iontů s molekulami vody v plynné fázi pro stopovou analýzu“

#### Student

Mgr. Michal Lacko začal pracovat v Praze v roce 2016 po ukončení studia na Komenského Univerzitě Bratislavě. V počáteční fázi svého doktorandského studia se na Ústavu fyzikální chemie J. Heyrovského seznamoval s metodami experimentálního výzkumu reakcí iontů s molekulami v proudové trubici. Během prvních dvou let zvládl metody pro výpočty kinetiky reakcí iontů s molekulami a samostatně vyvinul softwarový systém pro modelování komplexních reakčních systémů. Souběžně s tím studoval teoretické základy elementárních procesů v ionizovaném prostředí se specifickým zaměřením na reakce iontů s molekulami a seznámil se s literaturou v oboru použití těchto reakcí v citlivých metodách pro stopovou analýzu plynů včetně SIFT-MS a PTR-MS. Od roku 2016 se aktivně a iniciativně zapojil do práce na projektu Evropské Komise nazvaném „Ion-Molecule Processes for Analytical Chemistry Technologies“, IMPACT ITN jehož součástí byly konstrukce nových experimentálních aparatur a výzkum vlivu přítomnosti molekul vody na reakce důležité pro chemickou ionizaci pro analýzu těkavých organických látek. Michal Lacko provedl řadu experimentů na aparaturách SIFT-MS a SIFDT-MS v Praze, na aparatuře PTR-MS na spolupracujících zahraničních pracovištích. Během dalších let Michal přispíval k výzkumu velice tvůrčím a kreativním způsobem, samostatně vyhledával a studoval literaturu a přicházel s přínosnými nápady. Aktivně spolupracoval se zahraničními hosty v rámci projektu IMPACT i s dalšími kolegy na oddělení. Největší radost mi v poslední době dělalo, že pracoval velice samostatně a veškeré studie dotáhl do úspěšného konce.

Kromě vlastní experimentální práce získal i solidní základy v oblasti přípravy výzkumných projektů, peer-review procedur a prezentace na konferencích a jeho jméno začíná být známé v odborné komunitě jak ČR i v zahraničí.

#### Disertační práce

Tématem práce je experimentální studium procesů iontové chemie pro účely analýzy stopových plynů založené na hmotnostní spektrometrii s měkkou chemickou ionizací. Práce popisuje experimentální studie na stávajících přístrojích, jejich další úpravy a vylepšení, komplexní vyhodnocení dat a dále vývoj systému pro numerické simulace kinetiky soustav reakcí. Celkové zaměření popsaného výzkumu je dáno tématem vlivu přítomnosti vodní páry na měkkou chemickou ionizaci organických molekul. Konkrétně je v práci popsán vliv vodní páry na chemii iontů a její následní vliv na citlivost a selektivitu následujících metod hmotnostní spektrometrie pomocí chemická ionizace:

- hmotnostní spektrometrie v proudové trubici s vybranými ionty (SIFT-MS),
- hmotnostní spektrometrie pomocí reakce přenosu protonu (PTR-MS),
- hmotnostní spektrometrie v proudově-driftové trubici s vybranými ionty (SIFDT-MS).

Experimentální studie jsou doplněny teoretickými numerickým simulacemi studovaných procesů pomocí autorem vytvořeného programem KIMI.

V disertační práci autor popisuje výsledky zkoumání iontové chemie molekul formaldehydu, glyoxalu a ftalátů pomocí  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{NO}^+$  and  $\text{O}_2^+$  reakčních iontů, přičemž se zaměřuje na pochopení sekundárních reakcí iontových produktů s vodní párou. Dále se věnuje sekundárním reakcím protonovaných a hydratovaných molekul kyseliny mravenčí s acetonem. Nakonec popisuje analýzy monoterpenů kombinací rychlé plynové chromatografie (ppřístroje samostatně zkonstruovaného autorem) a SIFT-MS a ukazuje jak je takto možné redukovat vliv vodní páry na iontovou chemii.

Disertace je psaná formou komentovaného souboru článků v časopisech. Na 106 stranách rozvíjí téma studia iontových procesů pro vývoj analytických metod od přehledného úvodu přes podrobnou dokumentaci použitých experimentálních technik po konkrétní výsledky a diskusi jejich významu. Anglicky psaný text i ilustrace jsou informativní a kvalitní. Velice pěkný a hodnotný je úvod objasňující motivaci pro tuto práci a systematicky shrnující historii relevantních technik i veškeré klíčové fyzikální principy. Podíl práce Michala Lacka na 6 příložených člancích byl ve všech případech klíčový, a proto je prvním autorem 4 z nich a druhým autorem zbývajících 2. Práce zahrnuté v disertaci byly již 12x citovány (s vyloučením autocitací) což dokumentuje jejich mezinárodní závažnost a dopad. Další článek vycházející z kapitoly 4.4 byl po odevzdání disertace přijat k publikaci v prestižním časopise *Analytical Chemistry*, Michal Lacko je prvním autorem (Lacko M, Dryahina K, Španěl P, Kratzer J, Matoušek T, Dědina J. Selected Ion Flow Tube Mass Spectrometry as a Tool to Understand Hydride Atomization and the Fate of Free Analyte Atoms in an Externally Heated Quartz Tube Atomizer. *Anal. Chem.* 2022;94:13163-13170. <https://doi.org/10.1021/acs.analchem.2c02682> ).

Tato disertační práce prokazuje předpoklady uchazeče k samostatné tvořivé práci a jednoznačně ji doporučuji k obhajobě.