

Oponentský posudek
na doktorskou disertační práci
Mgr. Barbory Štádlkové

**Atomic fluorescence spectrometry with volatile species generation –
a sensitive tool for ultratrace elemental analysis**

**Atomová fluorescenční spektrometrie s generováním těkavých specií
– citlivý nástroj pro ultrastopovou prvkovou analýzu**

Doktorandka se ve své práci zaměřila na vývoj analytických metodologií založených na atomové fluorescenční spektrometrii, která se používá pro vysoce citlivé stanovení ultrastopových prvků.

Disertační práce navazuje na její diplomovou práci Optimalizace podmínek atomizace hydridů bismutu, olova a cínu pro účely vývoje atomizátorů hydridů. Obě práce byly realizovány na pracovišti Ústavu analytické chemie AV ČR, které se problematice tvorby hydridů a jejich detekce atomovou spektrometrií léta zabývá a patří mezi světové špičky v oboru. Další vědeckou erudici získala doktorandka během stáže na významném pracovišti Institut des Sciences Analytiques et de Physico-Chimie pour l'Environnement et les Matériaux, Université de Pau et des Pays de l'Adour ve Francii.

Cílem disertační práce bylo ověřit možnosti spojení atomového fluorescenčního spektrometru s různými technikami generování těkavých specií a možnosti použití různých excitačních zdrojů pro fluorescenční stanovení.

Pro vybraný prvek bismut byly zkoumány a porovnávány způsoby generování hydridů a to klasicky pomocí NaBH_4 v prostředí HCl (CHG) a generováním ve fotochemickém generátoru těkavých specií (PVG), obojí v uspořádání průtokové analýzy. K atomizaci byly použity a porovnávány dva plamenové atomizátory: miniaturní difúzní plamen (MDF) a tzv. flameingasshield atomizátor (FIGS). Experimenty byly prováděny na nedisperzním atomovém fluorescenčním spektrometru vyvinutém v laboratoři. Všechny technické detaily zařízení, podmínky experimentů a složení reakčních roztoků byly pečlivě optimalizovány. Detekční limity získané při použití MDF byly nižší než ty, získané za použití FIGS a dosahovaly úrovně pod 1ng.L^{-1} .

Na příkladu stanovení bismutu bylo prokázáno, že je možné jako excitačního zdroje místo běžně používaných bezelektrodoých výbojek (EDL) použít po optimalizaci provozních parametrů Superlampy a tak atomovou fluorescenční spektrometrii využít i pro stanovení prvků, pro které jsou bezelektrodové výbojky nedostupné.

Tato varianta byla použita pro stanovení niklu. Těkavé specie niklu byly generovány ve fotochemickém generátoru z roztoku obsahujícího kyselinu mravenčí.

Pro stanovení kadmia byl do redukčního roztoku NaBH_4 v HCl přidáván modifikátor $\text{Cr}^{3+}/\text{KCN}$. Po optimalizaci metody byla citlivost stanovení za použití FIGS atomizátoru podobně jako v případě bismutu dvakrát vyšší než za použití MDF atomizátoru a meze detekce rovněž pod úrovní $1 \text{ ng} \cdot \text{L}^{-1}$. Významnou výhodou této metody je možnost stanovení ultrastopových koncentrací kadmia v mořské vodě přímo, bez ředění. Dnes nejčastěji užívaná metoda pro stanovení stopových koncentrací prvků, ICP-MS, je limitovaná obsahem solí v mořské vodě, kterou je nutno před vlastním stanovením ředit a tak snižovat citlivost stanovení.

Všechny vyvinuté metody byly validovány a správnost byla ověřena analýzou řady referenčních materiálů.

Předložená práce shrnuje výsledky, které byly publikovány ve čtyřech renomovaných časopisech s vysokým impaktním faktorem: *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, (2020), *Microchemical Journal* (2021), *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* (2023), *Journal of Analytical Atomic Spectrometry*, (2023). Doktorandka je ve třech případech první autorkou. Výsledky týkající se metody stanovení niklu zatím nezveřejněny nebyly.

Kromě významných publikací doktorandka prezentovala jednotlivé výsledky své rozsáhlé práce na národních i mezinárodních konferencích.

Doktorandka během studia zvládla obtížnou práci v oblasti ultrastopové analýzy, obsluhu přístrojových zařízení, prokázala svoje technické dovednosti při optimalizaci součástí generátorů a atomizátorů fluorescenčního spektrometru, ale i zpracování a vyhodnocení získaných výsledků.

Disertační práce napsaná v anglickém jazyce je kvalitně zpracovaná. Je z ní zřejmá zasvěcená orientace doktorandky v oboru a její nadhled ve studované problematice.

Na závěr konstatuji, že oponovaná disertační práce představuje z pohledu svého rozsahu i obsahu hodnotnou vědeckou práci, která řeší aktuální problematiku na vysoké odborné i aplikační úrovni. Splňuje všechny vytyčené cíle. Prezentuje mimořádně široký

experimentální materiál přinášející nové poznatky v oblasti ultrastopové prvkové analýzy a je významným přínosem pro další rozvoj vědní disciplíny.

Mgr. Barbora Štádlerová dostatečně prokázala svoje tvůrčí schopnosti a splnila požadavky kladené na závěrečnou práci v doktorském studijním programu Analytická chemie na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy. Proto na základě předložené disertační práce a po její úspěšné obhajobě doporučuji udělit Mgr. Barboře Štádlerové vědecko-akademický titul

PHILOSOPHIAE DOCTOR (PhD.)

Brno, 7.2. 2024

prof. RNDr. Hana Dočekalová, CSc.