



POSUDEK OPONENTA HABILITAČNÍ PRÁCE

Název	Příspěvek k prvkové speciační analýze
Uchazeč	Ing. Antonín Kaňa, Ph.D.
Obor řízení	Chemické inženýrství
Pracoviště uchazeče	Fakulta chemicko-inženýrská, VŠCHT Praha
Oponent	doc. Ing. Lenka Husáková, Ph.D.
Pracoviště oponenta	Katedra analytické chemie, Fakulta chemicko-technologická, Univerzita Pardubice

Předložená habitační práce se zabývá vývojem a optimalizací metod analýzy vybraných nízkomolekulárních specií selenu a arsenu pomocí on-line spojení kapalinové chromatografie (LC) a hmotnostní spektrometrie s ionizací v indukčně vázaném plazmatu (ICP-MS). Kromě analýzy anorganických a organických specií byla dále pozornost věnována rozšíření možnosti charakterizace a stanovení anorganických nanočástic pomocí ICP-MS analýzy v režimu měření jednotlivých částic (sp-ICP-MS). Zde byly vyvinuty metody pro zpracování dat získaných ultrarychlým snímáním signálu. Aplikační potenciál navržených metod je demonstrován na analýze celé řady reálných vzorků.

Habitační práci tvoří komentovaný soubor 15 původních vědeckých prací publikovaných v letech 2013–2021. Text práce je rozdělen do několika kapitol, které mají za cíl podat ucelený přehled současného stavu znalostí problematiky a zároveň zhodnotit přínos použitých metod a postupů autora v dané oblasti. Komentář uzavírá literární přehled čítající 85 zdrojů a přílohy autorových prací souvisejících se studovanou tématikou. Úroveň odborného zpracování tématu a prezentace textu dokládá odborné kvality autora i jeho pedagogické schopnosti prezentovat danou problematiku. Některým pasážím textu by však podle mého názoru prospěla podrobnější diskuse. Jedná se konkrétně o problematiku zpracování a přípravy vzorků k analýze, strategii optimalizace jednotlivých kroků analytických postupů či validace a prezentace analytických charakteristik ve smyslu srovnání s dříve publikovanými přístupy. V závěrečném shrnutí by mohly být uvedeny rovněž vize a perspektivy dalšího výzkumu.

Z odborného hlediska a pohledu současné analytické praxe lze výsledky uvedené v habitační práci označit bez sporu jako originální. Rozšiřují pak do značné míry aplikáční možnosti použitých metod. K práci bylo přiloženo 15 důležitých publikací uveřejněných v renomovaných mezinárodních odborných časopisech, přičemž v databázi Web of Science či Scopus je v současnosti registrováno 33 prací autora, které byly více než 115x citovány. Podle údajů z těchto databází je zřejmé, že přibližně polovina příspěvků uspěla v časopisech zařazených do prvního (9) a druhého kvartilu (7) pořadí dle oboru. Všechny tyto publikace prošly náročným recenzním řízením, z detailního rozboru těchto prací je zřejmé, že podíl habilitanta na těchto výsledcích je zásadní.

Téma práce je aktuální, obdobný výzkum je v současnosti prováděn na řadě dalších zahraničních vědeckých pracovišť. Výsledky práce jsou zajímavé nejen pro odbornou veřejnost, nachází však také uplatnění v rutinní praxi. O perspektivě dalšího výzkumu Dr. Kani svědčí i jeho zapojení do vývoje měřicích a monitorovacích systémů pro stanovení specií selenu v rámci projektu MŠMT zaměřeného na přípravu selenem obohacených

bakterií mléčného kvašení a dalších průmyslově využívaných mikroorganismů. K pozitivnímu hodnocení odborných kvalit uchazeče rovněž přispívá úspěšné absolvování zahraniční stáže na excelentním pracovišti v Rakousku a schopnost spolupráce se špičkovými zahraničními vědeckými týmy. Aktivně se účastní národních konferencí i seminářů a je spoluautorem přednášek a posterů na mezinárodních konferencích. V přehledu odborné činnosti však postrádám osobně přednesené příspěvky na mezinárodních konferencích v zahraničí, recenzní činnost pro tuzemské a zahraniční vědecké časopisy, expertní a další podobnou činnost s oborem související.

Na VŠCHT se Dr. Kaňa několik let intenzivně podílí na výuce a vědecké výchově studentů v bakalářském, navazujícím magisterském i doktorském programu, a to v souladu s jeho odborným zaměřením. Je autorem a spoluautorem několika učebních textů, elektronických výukových opor a laboratorních úloh reflektujících stav současné analytické praxe. Kromě vědecko-výzkumných a pedagogických aktivit se Dr. Kaňa podílí i na ostatních činnostech spojených s rozvojem a propagací FCHI.

V souvislosti s posuzovanou prací mám na autora dva dotazy.

1. V textu je uvedeno, že použití metody sp-ICP-MS není z hlediska nastavení spektrometru příliš robustní a pro správné stanovení velikosti a koncentrace nanočastic je potřeba vybrané parametry rádně optimalizovat. Ze separátu publikací je však zřejmé, že přístup k optimalizaci vyvážených metod byl tzv. univariantní. Tento způsob však nemusí být vždy efektivní a poskytovat zcela přesné informace, a to zejména v situaci kdy mezi jednotlivými faktory existují interakce. Nebylo by v daném případě pro řešení vícefaktorové optimalizace vhodné využít např. efektivních, časově i ekonomicky úsporných nástrojů plánování experimentu? Vhodně zvolené plány, často i při větším počtu faktorů, umožňují významnou redukci experimentu, nalezení empirického modelu, významných faktorů a úrovní jejich nastavení, při kterých je dosaženo optimálních hodnot sledované veličiny.
2. Některé z navržených analytických postupů představují silné nástroje pro rutinní, počtem vzorku náročné a matricově bohaté aplikace. Řešení polyatomických interferencí, zejména s využitím vybraných reakčních plynů, je zde často klíčovým prvkem pro zajištění kvality analytických výsledků. V současné době se v ICP-MS praxi do značné míry jako univerzální jeví použití kolizních cel s He, které umožňují výrazné snížení polyatomických interferencí pro většinu analytů, často i bez nutné počáteční znalosti složení vzorku či ztráty signálu analytu reakcí. Autor by tak prosím mohl stručně shrnout výhody a nevýhody obou přístupů pro potřeby korekce spektrálních vlivů při speciační analýze vzorků s variabilní matricí, a to např. s ohledem na robustnost, detekční schopnost, analytický výkon, možnost realizace víceprvkové analýzy, usnadnění vývoje nových postupů apod.

Na základě uvedených skutečností doporučuji habilitační práci k dalšímu řízení na Fakultě chemicko-inženýrské, VŠCHT v Praze a po úspěšné obhajobě **doporučuji** jmenování Ing. Antonína Kani, Ph.D. docentem pro obor Chemické inženýrství.



V Pardubicích, 18. 01. 2022

doc. Ing. Lenka Husáková, Ph.D.