

POSUDEK OPONENTA BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Autor práce: Aneta Dušková

Název práce: Rentgenová fluorescenční analýza biologických vzorků

Bakalářská práce Anety Duškové se zabývá možností využití rentgenové fluorescence (XRF) pro analýzu prvkového složení přírodních organických materiálů. Teoretickou část tvoří shrnutí fyzikálních principů metody, popis nezbytného přístrojového vybavení a dále poměrně rozsáhlá rešerše aplikace XRF pro studium biologických vzorků. Experimentální část závěrečné práce je zaměřena na nalezení vhodného nastavení XRF aparatury na KDAIZ s ohledem na požadavky pro identifikaci lehkých prvků. Studentka prověřila tři konfigurace měřicí sestavy. V uspořádání, při kterém bylo dosaženo nejnižších limitů detekce, pak provedla analýzu několika vzorků neznámého složení.

Realizované experimenty jsou adekvátně popsány, výsledky měření jsou prezentovány přehledně, nechybí ani jejich základní interpretace. Nedostatečná pozornost však byla věnována stanovení nejistot měření. Jejich celková absence je mou nejzásadnější připomínkou k předložené práci. Autorka se k tomuto vyjadřuje na s. 49 a zmiňuje důvody, proč jsou výsledky prezentovány bez nejistot. Uvedené argumenty ohledně metody výpočtu ploch peaků a použitého referenčního materiálu jsou bezesporu relevantní ve vztahu k přesnosti měření. V žádném případě však nejsou a ani nemohou být zdůvodněním toho, aby nejistoty nebyly stanoveny vůbec (případně alespoň řádově odhadnuty).

Celkově je text práce, přes drobné nepřesnosti v některých formulacích, dobře srozumitelný a bez závažných jazykových nedostatků. Taktéž počet tiskových chyb nebo překlepů je minimální. Nesprávně je však použita kurzíva pro sazbu jednotek fyzikálních veličin a označení chemických prvků. Obrazový doprovod bakalářské práce je v dostatečné tiskové kvalitě. Náčrtky doplňující teoretickou část jsou přehledné; obrázek 2.6 (s. 22) je podle mého názoru dokonce názornější než originál v citované publikaci. Konzistenci celého dokumentu též prospívá, že studentka u náčrtků převzatých z literatury upravila popisky do jazyka práce.

Konkrétní poznámky a další připomínky k předloženému textu uvádím níže.

- Úvodní věta říkající, že „*klasická XRF analýza je založena na ozáření zkoumaného materiálu rentgenovým zářením*“ (s. 10) ne zcela přesně vystihuje základní princip této analytické metody. Dále není obecně pravdou, že fotoefekt je podmínkou pro vznik fluorescence; k vyrazení orbitálního elektronu z vnitřní slupky může dojít též jiným procesem, což je ostatně i v textu práce dále zmíněno (s. 13 nebo s. 24).
- Tvzení „*záření X (...) při krátkých vlnových délkách přechází do záření gama a při dlouhých do UV záření*“ (s. 12) není šťastně formulováno, jelikož pomíjí principiální rozdíl mezi zářením rentgenovým a gama.
- Na s. 12 je řečeno, že intenzita brzdného záření generovaného protony je proti elektronům zhruba o čtyři řády nižší. Tato hodnota však odpovídá spíše mionům.
- V podkapitole o interakci rentgenového záření s látkou je uvedeno, že „*při průchodu svazku látkou se zeslabuje jeho intenzita a klesá tedy jejich [jednotlivých interakcí] pravděpodobnost*“ (s. 16). Z této věty by mohl čtenář nabýt dojmu, jako by účinné průřezy závisely na intenzitě svazku.

- Komentář k definici limitu detekce (2.11) na s. 18. neshrnuje přesně problematiku diskutovanou v citovaném článku [7]. V dalším odstavci uvedené využití detekčního limitu neodpovídá ani definici tohoto parametru, ani smyslu jeho zavedení v analytických metodách.
- Autorka na s. 19 uvádí, že spektrometrem je míněn soubor všech přístrojů a komponent potřebných pro provedení XRF analýzy. V souladu s touto definicí pak je možné brát například budící zdroj ionizujícího záření coby součást spektrometru. Terminologicky vhodnější by se mi ovšem jevílo celou sestavu označovat jako XRF analyzátor a spektrometrem nazývat pouze měřidlo tvořené detektorem a vyhodnocovací elektronikou.
- Namísto radioizotopu je v daném kontextu lépe použít termín radionuklid (s. 23).
- Radionuklidové zdroje záření alfa nepatří mezi zdroje využívající urychlené částice (s. 24).
- Vyhodnocení registrace dvou fotonů jako jedné události není ani tak záležitostí detektoru, jako spíše elektronických modulů spektrometrické trasy (s. 25).
- Při hledání nejvhodnějšího uspořádání aparatury byly experimentálně prověřeny tři konfigurace, které jsou na s. 38–39 popsány slovy. Pro větší názornost by se hodilo doplnit tabulku s přehledným shrnutím všech důležitých parametrů. Případně též použít více návodné označení než jen „1., 2. a 3. uspořádání“.
- Vypočítané limity detekce pro třetí uspořádání jsou o něco nižší než pro uspořádání druhé, rozdíl však u některých linek charakteristického záření nejsou výrazné. Pro formulaci kvantitativně podloženého závěru by bylo velmi žádoucí mít k dispozici nejistoty získaných hodnot.
- Namísto „záření pocházejícího ze spektrometru“ (s. 43) by bylo lépe hovořit o záření nemajícím původ v měřeném vzorku.
- Limit detekce udává hodnotu koncentrace prvku, kterou XRF analyzátor detekuje s určitou pravděpodobností chyby 2. druhu. Nelze proto vyvozovat, že pokud vypočítaná koncentrace nepřesahuje hodnotu limitu, není možné přítomnost prvku ve vzorku vůbec potvrdit (s. 47).
- Mapa koncentrace zinku na obrázku 3.13 je podle legendy v lineární škále, nikoli v logaritmické, jak je uvedeno v popisku.
- Úvod a závěr se obvykle nečíslují pořadovým číslem kapitoly.
- Citace by měly být v textu kladeny v místě, kde je poprvé zmíněn citovaný poznatek, a to nejpozději na konci příslušné věty. Umístění citační značky až za poslední větu odstavce není správné. V případě využití rozsáhlých monografií, lze též doporučit uvádět v citacích doplňující údaj o stránkách.

K práci mám následující otázky:

1. V podkapitole 2.2.4 jsou zmíněny aspekty bezpečnosti při práci se zdroji rentgenového záření. Jakým způsobem jsou pravidla radiační ochrany uplatňována v XRF laboratoři na KDAIZ?
2. V rešerši věnované analýze biologických vzorků je uvedena rentgenová fluorescenční analýza s totálním odrazem (s. 30). Čím se tato varianta liší od klasické XRF analýzy?
3. Jakým způsobem byla vybrána tři uspořádání aparatury, jejichž vhodnost pro analýzu biologických vzorků byla dále podrobně zkoumána?
4. Byla pro vykreslení map koncentrací prvků (obrázky 3.8 až 3.19) naměřená data nějakým způsobem interpolována?

Závěrem mohu konstatovat, že Aneta Dušková splnila všechny úkoly uvedené v zadání bakalářské práce. Výsledky provedených měření jsou užitečné pro další rozvoj XRF analýzy na pracovišti KDAIZ.

Práci doporučuji k obhajobě a navrhuji hodnocení B (velmi dobře).

V Praze dne 6. září 2021

Ing. Pavel Novotný
KDAIZ FJFI ČVUT v Praze