

Oponentní posudek

habilitační práce Ing. Mojmíra Němce, Ph.D.

„Příprava vzorků pro urychlovačovou hmotnostní spektrometrii“

Předložená habilitační práce pojednává o výsledcích vývoje postupů přípravy vzorků pro měření ^{14}C a ^{236}U urychlovačovou hmotnostní spektrometrií (AMS). Habilitační práce je členěna do 6 kapitol, soupisu citované literatury (úctyhodných 195 citací) a příloh se 4 články v recenzovaných, impaktovaných časopisech, na nichž je habilitační práce založena. Dále je v přílohách uvedeno 21 citací na autorovy publikace v časopisech a sbornících, které souvisí s tématem habilitační práce.

V úvodu (kap. 1) je nastíněna struktura habilitační práce, jako komentář k autorovým publikacím věnovaným přípravě vzorků pro stanovení ^{14}C a ^{236}U metodou AMS. Práce týkající se stanovení ^{14}C vznikly při autorově postdoktorandském pobytu v Laboratory of Ion Beam Physics, ETH Zürich, Švýcarsko. Je zdůrazněno, že, jak vyplývá z dosažených výsledků, je k využití potenciálu AMS, která je jednou z nejcitlivější existujících analytických metod, nezbytná součinnost fyziků provozujících AMS, chemiků a uživatelů (zadavatelů) analýz. Jedině tak lze dosáhnout, že bude připraven a analyzován reprezentativní analytický vzorek a že výsledek analýzy bude možno věrohodně interpretovat.

Kap. 2 stručně pojednává o historii a zrození AMS, udává základní princip a popisuje jednotlivé součásti experimentálního zařízení. Jsou zde uvedeni i současní výrobci urychlovačů a pro názornost jsou zmíněna vybraná instalovaná zařízení. V kap. 3 jsou shrnuty požadavky na použití AMS, je diskutováno potlačení izobarických interferencí a normalizace výsledků a je uveden přehled nuklidů stanovovaných a stanovitelných metodou AMS. V důležité podkapitole 3.3 je pojednáno o přípravě vzorků pro měření stopových koncentrací.

V kap. 4 je rozsáhle diskutováno radiouhlíkové datování. Pozornost je věnována stanovení a korekci izotopového poměru $^{14}\text{C}/^{12}\text{C}$, přirozeným změnám izotopového poměru $^{13}\text{C}/^{12}\text{C}$, je vysvětlena OXA konvence a převod hodnot naměřených AMS na konvenční ^{14}C hodnoty. V oddílu 4.2 je věnována patřičná pozornost odběru a přípravě vzorků před vlastním měřením AMS. V dalších částech této kapitoly jsou kriticky zhodnoceny postupy pro datování kostí a uhlíků a největší pozornost je věnována datování dřeva. Autor navrhl nové metody separace celulózy a porovnal je s dosud používanými. Nejrozsáhlejší částí této kapitoly je problematika grafitizace, která je v současné době standardním postupem přípravy vzorků uhlíku pro přesná měření metodou AMS. Po přehledu různých způsobů grafitizace autor habilitace uvádí výsledky vlastního výzkumu, který vyústil v automatickou grafitizační jednotku (Automated Grafitization Equipment – AGE), v příslušné publikaci právem nazvanou revolučním grafitizačním systémem, která nalezla i komerční uplatnění.

Kap. 5 je věnována stanovení ^{236}U , který je monitorem jak přírodních procesů, tak antropogenních aktivit souvisejících s produkcí, manipulací a přepracováním ozařeného jaderného paliva, případně radioaktivních odpadů. Jedná se o relativně novou a náročnou problematiku, pro niž je klíčová příprava vzorků vzhledem k rozdílu až 6 řádů mezi antropogenním a přírodním izotopickým poměrem $^{236}\text{U}/^{238}\text{U}$. I v této problematice přispěl Ing. Němec k vývoji nového způsobu přípravy vzorků spolusrážením U na TiO_2 připraveném hydrolýzou tetra-n-butylorthotitanátu (TBOT) s minimálním rizikem kontaminace antropogenním ^{236}U .

Habilitační práce Ing. M. Němce, Ph.D. je sepsána přehledně, téměř učebnicovým způsobem. Práce má vysokou grafickou úroveň a obsahuje jen malý počet překlepů a tiskových chyb, které proto ani neuvádím. Ing. Němec se projevil jako velmi schopný experimentátor v oblasti (radio)analytické chemie a při návrzích, realizaci a řízení nového přístrojového vybavení jak po stránce hardwaru, tak softwaru. Způsob sepsání habilitační práce také dokazuje, že své výsledky dokáže dobře prezentovat a že má tedy dobré pedagogické schopnosti.

Připomínky mám jen k nedůslednému používání SI jednotek. Tlak by měl vyjadřován v hlavní jednotce SI - pascal nebo v jeho násobcích, ne v barech či mbarech. Látkové množství by mělo být důsledně vyjadřováno např. v mg kg^{-1} , mg l^{-1} , ne v „ppm“ či „ppb“. Pro látkovou koncentraci lze v chemické literatuře akceptovat zkratku „M“, i když správnější je mol l^{-1} nebo mol dm^{-3} . Musím také připomenout nedávnou změnu v terminologii týkající se „přesnosti“ a „správnosti“ výsledků. Podle nového českého překladu Mezinárodního metrologického slovníku – Základní a všeobecné pojmy a přidružené termíny (VIM), viz Sborníky technické harmonizace, ÚNMZ, 2010, je anglický termín „measurement accuracy“ překládán jako „přesnost měření“, termín „measurement precision“ jako „preciznost měření“. Nepovažuji tyto překlady za šťastné, vzhledem k tradičnímu chápání pojmů přesnost a správnost v analytické chemii jsou spíše matoucí. Asi bude nějaký čas trvat, než si na tento překlad česká odborná veřejnost zvykne, bude však nutné jej akceptovat a zavádět i ve výuce studentů příslušných oborů. Minimálně je zapotřebí uvést, co se nyní problematikým termínem „přesnost“ míní.

K předložené habilitační práci mám také dvě otázky:

- Jak se v metodě AMS zjišťuje výtěžek požadovaných iontů z terče v případě ^{14}C a ^{236}U ?
- Jaké jsou typické či dosažitelné nejistoty stanovení ^{14}C a ^{236}U metodou AMS?

Závěrem konstatuji, že uvedené drobné připomínky nejsou kritikou vysoké vědecké hodnoty a kvality výsledků, které Ing. Němec dosáhl a uvedl ve své habilitační práci. Proto doporučuji habilitační komisi a Vědecké radě FJFI ČVUT v Praze přijmout habilitační práci Ing. Mojžíra Němce, Ph.D. jako součást podkladů pro jmenovací řízení docentem v oboru „Jaderná chemie“.

prof./Ing. Jan Kučera, CSc.

V Řeži 10.8.2015

Ústav jaderné fyziky AV ČR, v. v. i.

250 68 Husinec-Řež