

Posudek habilitační práce

Využití analytické chemie pro studium hmotného kulturního dědictví předložené RNDr. Lukášem Kučerou, Ph.D.

Předložená habilitační práce je tvořena o málo více jak 30 stranami původního českého textu doprovázeného abstraktem, seznamem zkratk a tzv. literaturou, která je však pouze přehledem 12 příložených publikací se spoluautorstvím habilitanta. Příložené publikace tvoří svým rozsahem i obsahem rozhodující součást habilitační práce.

Můj první dojem z práce byl na základě letného prolistování poněkud rozpačitý. Jak vyplývá z níže uvedeného posouzení, moje rozpaky se nerozplynuly ani po podrobném prostudování celého díla včetně příložených publikací. Omlouvám se proto za neobvykle dlouhý posudek s rozbořením řady dílčích kladů i dle mého názoru ne zcela zanedbatelných nedostatků. Díky příloženým 12 publikacím je rozsah práce mimořádný, vědecký přínos je nepochybný, objem provedených experimentů i rozsah jejich interpretace je úctyhodný. Nicméně velmi stručný obsah o dvou nečíslovaných a pěti číslovaných položkách (s číslováním 1, 2, 3, 4 a 6, tj. položka 5 chybí) uvádí čísla stran celkově sedmi poněkud nesourodých položek (nikoli kapitol). První položka obsahu odpovídá straně 6, poslední pak straně 41. V celé práci chybí číslování stran, což je nezvyklé a neusnadňuje to práci posuzovatele.

Za obsahem je uveden velmi stručný abstrakt, který popisuje členění díla. Je též chvályhodné, že autor klade důraz na vzájemnou komunikaci, která je jistě důležitá pro dnešní týmovou vědeckou práci, obzvláště při řešení multidisciplinárních témat. Multidisciplinarita je jistě kladem předkládané habilitační práce. Nepochybně není jednoduché obsáhnout široké mnohooborové téma i širokou škálu využívaných analytických metod. V abstraktu však postrádám informaci o hlavním vědeckém přínosu práce či o vědecké motivaci, která vedla k výběru 12 příložených prací z celkově 31 děl autora uváděných na jeho ORCID straně (<https://orcid.org/0000-0002-3773-6439>) resp. 32 dokumentů uvedených ve SCOPUSu (Scopus Author ID: 55567874600).

Po abstraktu následuje seznam použitých zkratk, což osobně vítám. Pro čtenáře je příjemné se hned na začátku seznámit s použitými zkratkami. Bohužel dojem kazí poměrně značné množství překlepů a formálních chyb na limitované počtu řádků (například „ionotvou“, „hmotní“, „ionizací“, „monitoringu“ místo „monitoring“, „mikrodifrakcí“ místo „mikrodifrakce“). Osobně bych raději při prvním uvedení daného pojmu hovořil o „hmotnostně spektrometrické detekci“ než o „hmotnostní detekci“ stejně o „Ramanově mikrospektroskopii“ než „Ramanově mikroskopii“ (to jsou však méně podstatné terminologické pohledy).

Následuje text členěný do několika velmi stručně nadepsaných kapitol. Překlepů, chybějících předložek či dalších jazykových či terminologických nedokonalostí jsem v textu práce našel více než bych u poměrně stručného českého textu (odhadem 30 stran) očekával. Podoba psaní velkých písmen a čárek, podobně jako celková typografická úprava kapitoly **5. Závěr** je velmi nezvyklá. Navíc v úvodním obsahu tato kapitola není uvedena. Dovoluji si poznamenat, že pokud jsou kdekoli v textu uváděny údaje v procentech, tak bych v odborném textu očekával, že bude explicitně uvedeno, zda jsou procenta odvozena od hmotnostních, molárních či objemových zlomků. V textu práce je jen minimalisticky užíván citační aparát (ve formě poznámek pod čarou) s výjimkou odkazů na 12 příložených spoluautorských publikací. Grafická

kvalita některých obrázků je poněkud nízká, což obzvláště v případě obrázků 10, 11, 15 a 22 neumožňuje čtenáři řádně porozumět jejich obsahu. Mnohé popisy obrázků jsou velmi stručné, takže bez pečlivého čtení textu je obtížné pochopit, co je na obrázcích uvedeno. I při nízké obrazové kvalitě již zmíněného obrázku 10 se nemohu ubránit dojmu, že spektra vykazují nekvalitní kompenzaci vzdušné vlhkosti a vzdušného oxidu uhličitého. Prosím autora, aby při ústní prezentaci krátce popsal podmínky záznamu a způsob zpracování vibračních spekter, neboť v českém textu jsem tyto informace nenalezl. I v některých přiložených publikacích jsou příslušné údaje poměrně kusé. V případě dat získaných analýzou hlavních komponent (PCA) postrádám mnohdy grafy komponentních zátěží a také rozbor procent vysvětlené variability (variance) jednotlivými hlavními komponentami. Není zřejmé, proč se autor prakticky výhradně zaměřuje jen na první a druhou hlavní komponentu (i v případech, kdy vysvětlují méně než 70 % variability dat).

Konstatuji, že asi nelze očekávat, že Mössbauerova spektroskopie (tak jak se běžně užívá) by poskytla informace o jiném prvku, než je železo. Tj. výrok na nečíslované straně, že pomocí Mössbauerovy spektroskopie je zřejmé, že korozní vrstva je tvořena železem, nepokládám za šťastný. K zjištění přítomnosti jiných prvků je třeba použít jiné analytické metody.

Řada informací v textu je na druhou stranu naprosto v pořádku, odpovídá mnohem podrobnějším datům, diskusím a závěrům v jednotlivých přiložených publikacích, které (snad) prošly kvalitním recenzním řízením. Potěšil mne stručný závěr, byť bych uvítal důraz na vědecký přínos práce a výstižný nástin možných budoucích dopadů dosažených výsledků, nebo vizi dalšího metodického rozvoje v kombinaci analytické chemie a archeologie.

Bohužel ještě musím konstatovat, že přiložené publikace nejsou očíslované, takže se je pokusím specifikovat dle názvu časopisu a roku vydání. Pokud bych byl recenzentem práce *Molecules* **2022**, 27, 5205, tak bych požadoval revizi kapitol věnovaných Ramanově spektroskopii. Nenalezl jsem informaci o použitém objektivu a jeho zvětšení, velikosti stopy paprsku na povrchu vzorku, spektrálním rozlišení či parametrech detektoru. Formulace „... and 16 sample exposures 16“ je mně nesrozumitelná. Z kolika míst byla spektra měřena a byla zkoumána jejich stabilita v čase? V práci publikované ve *Studia Barbarica* **2018** postrádám jako doplněk k výsledkům PCA (Fig. 7) informace o komponentních zátěžích. Opět bych očekával informace k více jak dvěma hlavním komponentám, které zdaleka nevysvětlují celkovou variabilitu dat.

V tisku práce z *Památky archeologické* – supplementum 21 z roku **2020** jsou nečitelné obrázky 283 a 284. Jaký byl materiál použitého ATR krystalu? O kolikaodrazový krystal se jednalo? Jaké bylo spektrální rozlišení? Mohl bych pokračovat méně důležitými dotazy. Jaký byl použit dělič paprsků a jaký byl použit detektor? Jakým způsobem bylo zaznamenáno pozadí? Byla věnována pozornost kompenzaci vzdušné vlhkosti a oxidu uhličitého? Jakým způsobem byly fixovány vzorky jantarů k ATR krystalu?

V práci publikované v *Materialia* **2021**, 15, 101025 pokládám za nedostatečné informace týkající se AFM experimentů. Jaký je tvar použitého hrotu (např. kuželový, pyramidální) a jaké je jeho vrcholové zakřivení? Jaká byla amplituda kmitů v poklepovém módu? Jaká byla rychlost laterálního skenování? Jak velké plochy vzorků byly zkoumány, resp. jaké byly rozměry oblasti skenované pro jeden jednotlivý záznam? Ve stejné práci postrádám informaci o spektrálním rozlišení Ramanových spekter. Byla sledována či odhadována teplota v místě sběru záření Ramanova rozptylu? V práci jsou uvedena dvě odlišná spektra odpovídající dvěma hodnotám výkonu laseru. Byla zkoumána časová stabilita, resp. nestabilita pozorovaného rozdílu? Byl tento rozdíl opakovatelný na různých místech vzorku příp. na několika vzorcích?

Oceňuji, že v publikaci vydavatele DE GRUYETER z roku **2022** je uveden i graf komponentních zátěží vedle grafu komponentního skóre. Škoda, že jsem takové grafy nenalezl i v jiných případech.

Celkově jsou publikované práce dle mého názoru odborně kvalitní a poukazují na širší výzkumného záběru habilitanta i na jeho schopnost pracovat v multidisciplinárním týmu. Publikované práce nepochybně snesou mezinárodní srovnání a jsou přínosné nejen pro vědeckou komunitu.

Dotazy:

Jaká procenta jsou uváděna na svislé ose obrázku 1?

Na základě jaké literatury byla interpretována infračervená a Ramanova spektra (např. na obrázcích 9 a 10)?

Dovolil bych si požádat o informaci, jaký podíl variability dat vysvětluje třetí případně čtvrtá hlavní komponenta v návaznosti na informace uvedené na obrázku 11.

V kapitole 4 jsou používány různé zápisy uvozovek (nahore či dole, různé typy písma). Má tato různorodost zápisu nějaká pravidla a nějaký účel (který jsem nepochopil)?

Jaká je nejistota určení tloušťek povrchových vrstev u mincí (text na nečíslované straně pod obrázkem 14)? V textu je uveden údaj „okolo 14 μm “ získaný digitální mikroskopií. Výškové rozdíly získané AFM jsou uvedeny číselně „1,7, 2,2 a 4,6 μm “. Vztahu těchto hodnot podle mne neodpovídá výrok, že „tyto hodnoty jsou zhruba 12-33krát nižší než výška stanovená z digitální mikroskopické analýzy“. (Pokud vynásobím nejmenší uvedené hodnoty, tj. $1,7 \times 12 = 20,4$, získám hodnotu 20,4, což je více jak 14.) Mohl by autor vysvětlit tento (dle mého soudu) rozpor? Jaká byla v této souvislosti výška a frekvence oscilací hrotu v poklepovém režimu AFM? Jaká byla rychlost laterálního skenování při měření AFM topografie?

Dovoluji si požádat o vysvětlení, co je míněno pojmem „distribuce pásu“ u velmi stručného popisu obrázku 16.

Co znamená pojem „naměřené intenzity jednotlivých prvků“ v odstavci pod obrázkem 17? Co je vysoká intenzita železa (např. s odkazem na obr. 24)?

Prosím o vysvětlení souvislosti habilitační práce se skutečností, že dvě studentky v rámci středoškolské odborné činnosti se podílely na vzniku publikací, resp. jsou spoluautorkami publikací. Jaký je byl tedy podíl habilitanta na uvedených publikacích?

Jak byly vytvořeny „krabicové grafy intenzit Cu, Pb a Fe“ (obrázek 18)?

Jaká je velikost polí v rámci zobrazování distribuce prvků na obrázku 19?

Co znamenají řádově odlišné stupnice hodnot v částech C a D obrázku 24, jestliže je popis osy „Ratio Ca/Fe“? Očekával bych, že poměr zastoupení dvou prvků v sadě vzorků bude obdobný bez ohledu na to, zda jsou zdrojovými daty výstupy z XRF nebo ICP-MS.

Odovídá nastavení popisu píků v Ramanových spektrech na dvě desetinná místa (Obr. 4 v práci *Studia Archaeologica Brunensia* **2022**) možností použitého spektrometru? (V této práci je nevhodně použit termín energie laseru (hodnota uvedena v mW) a opět chybí informace o spektrálním rozlišení.)

Ještě závěrem jeden obecnější dotaz. Co je míněno pojmem „filozofické vědy“?

Po prostudování celé habilitační práce včetně publikačních příloh konstatuji, že nepochybuji o vědecké erudici a mimořádné pracovitosti habilitanta. Oceňuji též jeho zájem o zapojení středoškolských studentů do vědecké práce. Cením si jeho důrazu na týmovou práci. Vše uvedené tedy vede k doporučení pokračování habilitačního řízení. Souhlasím s přijetím předložené práce jako práce habilitační, ale vřele doporučuji, aby předložená práce byla před

archivací opatřena důkladným seznamem „Errata“ pokrývajícím podrobně cca 35 stran textu (bez příloh), nebo (pokud to pravidla umožňují) byl předložen opravený, kvalitně barevně vytištěný výtisk obsahující číslování stránek, obsah práce se všemi správně číslovanými položkami a eliminující mnohé typografické či jazykové chyby a nedostatky.

Vědecká tvůrčí práce habilitanta snese mezinárodní srovnání, habilitační práce včetně příloh poukazuje na to, že si titul docenta zaslouží. Pokud je jako součást habilitačního řízení požadována samostatná habilitační práce (a nikoli jen přehled publikací), nelze rezignovat na formální, jazykovou a terminologickou úroveň takového díla. Své celkově kladné stanovisko k habilitační práci tak doprovázím pádnu žádostí o zjednání nápravy buď doplněním práce o pečlivě vypracovaný přehled oprav („Errata“) nebo doplněním předkládaných dokumentů o formálně a jazykově kvalitní výtisk (příp. odpovídající elektronickou podobu díla ve formátu pdf).

V Praze a Hřebči dne 3. července 2024

Pavel Matějka
VŠCHT Praha