

Posudek vedoucího práce na diplomovou práci

Bc. Anny Kallistové

Krystalochemie pyroxenů a amfibolů z Českého středohoří

Cílem práce byla komplexní charakteristika klinopyroxenů a klinoamfibolů z vulkanoklastik a subvulkanitů Českého středohoří resp. Roztockého intruzivního centra pomocí mineralogických metod. Část vzorků představovala volné krystaly, zbytek byly separáty z hornin a výbrusy.

Jako vhodný komplex metod byla zvolena kombinace elektronové mikroanalýzy pro stanovení hlavních prvků a LA-ICP-MS pro určení obsahů vedlejších a stopových prvků. Prášková rentgenová difrakce byla stanovena jako metoda volby pro strukturní studium. Pro potvrzení správnosti výsledků strukturních zpřesnění z práškových difrakčních záznamů byly pro vybrané vzorky pořízeny ještě záznamy pomocí 4-kruhového monokrystalového difraktometru.

Ačkoliv (nebo možná právě z toho důvodu že) je diplomantka vrcholová sportovkyně s minimem volného času, vrhla se do práce s nebyvalou intenzitou. Záhy dokázala nastudovat značný objem literatury, který jsem pro ni jako úvod do problematiky připravil. Kromě samostudia literatury prošla A. Kallistová školením práce s programy JANA2006 pro řešení a zpřesňování monokrystalových dat (na FzÚ AV ČR) a FullProf pro Rietveldovské zpřesnění struktur z práškových dat (na GIÚ AV ČR). Během zpracovávání difraktogramů se ještě navíc seznámila s ovládáním programu Bede ZDS Search/Match pro kvalitativní fázovou analýzu.

Práškové difraktogramy si diplomantka pořizovala sama (na ÚGMNZ) včetně následného vyhodnocení, zahrnujícího fázovou identifikaci, zpřesnění mřížkových a profilových parametrů LeBailovou metodou a zpřesnění krystalové struktury metodou Rietveldovou. Monokrystalová data byla pořízena na Katedře anorganické chemie PřFUK, kde byla rovněž provedena korekce na absorpci. Vlastní strukturní zpřesnění ale už prováděla diplomantka sama. Kompoziční data získaná pomocí EPMA resp. LA-ICP-MS byla buď diplomantkou přímo měřena anebo se A. Kallistová jejich sběru zúčastňovala. Pro převod makroprvků na empirické vzorce byly diplomantkou v tabulkovém procesoru Excel vytvořeny postupy, které umožnily nejen výpočet koeficientů vzorce, ale i klasifikačních parametrů.

Výsledky studia jsou v DP adekvátně zpracovány včetně takových aspektů, jakými je např. kritické zhodnocení způsobu klasifikace pyroxenů podle v současnosti platného klasifikačního schématu nebo diskuse správnosti zpřesnění struktur z práškových dat na pozadí údajů z monokrystalu. Diplomantka také detailně zpracovala otázky zonality studovaných fází, substituční trendy a nebála se pustit do petrogenetických resp. geochemických diskusí na základě dat z LA-ICP-MS. To vše vycházelo ze znalostí literatury, které demonstruje seznam citací zahrnující na 50 titulů.

Závěr: Diplomová práce podle mě zcela splnila vytčené cíle, má jasnou strukturu, výsledky prezentuje jasně a přehledně a obsahuje i značné množství zcela nových dat vhodných po drobných úpravách k publikaci. Proto DP **doporučuji k přijetí.**

V Praze 10. září 2010



RNDr. Roman Skála, Ph.D.

GIÚ AV ČR, v.v.i., Rozvojová 269, 165 00 Praha 6

ÚGMNZ, PřF UK, Albertov 6, 128 43 Praha 2