



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ

FACULTY OF CHEMISTRY

**ÚSTAV CHEMIE A TECHNOLOGIE OCHRANY ŽIVOTNÍHO
PROSTŘEDÍ**

INSTITUTE OF CHEMISTRY AND TECHNOLOGY OF ENVIRONMENTAL PROTECTION

**FORENZNÍ ANALÝZA PŮDY METODAMI FTIR A NIR S
MULTIVARIAČNÍ ANALÝZOU**

THE FORENSIC ANALYSIS OF SOIL BY FTIR AND NIR WITH MULTIVARIATE ANALYSIS

DIPLOMOVÁ PRÁCE

MASTER'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Bc. Pavel Nawrath

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Mgr. Helena Doležalová Weissmannová, Ph.D.

BRNO 2020

Zadání diplomové práce

Číslo práce: FCH-DIP1464/2019 Akademický rok: 2019/20
Ústav: Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí
Student: Bc. Pavel Nawrath
Studijní program: Chemie a technologie ochrany životního prostředí
Studijní obor: Chemie a technologie ochrany životního prostředí
Vedoucí práce: Mgr. Helena Doležalová Weissmannová, Ph.D.

Název diplomové práce:

Forenzní analýza půdy metodami FTIR a NIR s multivariační analýzou

Zadání diplomové práce:

1. Literární rešerše zaměřená na aplikaci IR metod pro analýzu půd.
2. Odběr vzorků půd.
3. Analýza půd a interpretace výsledků.

Termín odevzdání diplomové práce: 29.5.2020:

Diplomová práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu. Toto zadání je součástí diplomové práce.

Bc. Pavel Nawrath
student(ka)

Mgr. Helena Doležalová
Weissmannová, Ph.D.
vedoucí práce

doc. Ing. Jiří Kučerík, Ph.D.
vedoucí ústavu

V Brně dne 31.1.2020

prof. Ing. Martin Weiter, Ph.D.
děkan

ABSTRAKT

Diplomová práce se zabývá forenzní multivariační analýzou půdy v lokalitách Ostrava a Třinec. Celkem bylo odebráno 52 vzorků v oblastech hutních společností. U vzorků byly stanoveny koncentrace chromu, manganu, mědi, niklu, olova, rtuti a zinku. Pro stanovení rtuti byl použit přístroj AMA 254. Zbylé kovy byly stanoveny pomocí atomové absorpční spektrometrie s atomizací v plameni (F–AAS). Dále byla proměřena IČ spektra. Měření bylo provedeno pomocí infračervené spektrometrie s Fourierovou transformací (FTIR) technikou difúzní reflektance (DRIFT). Výsledky byly následně použity pro vytvoření korelačních modelů a statistických modelů metod PCA (analýza hlavních komponent) s CA (klastrová analýza).

ABSTRACT

This diploma thesis is about forensic multivariate soil analysis in the localities Ostrava and Třinec. A total of 52 samples were taken in the areas near metallurgical companies. These samples were measured for concentrations of chromium, manganese, copper, nickel, lead, mercury and zinc. Mercury concentration was analysed using AMA 254 device. The remaining metals were determined by flame atomic absorption spectrometry (F–AAS). Additionally, IR spectra were acquired by Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) using diffusion reflectance technique (DRIFT). In the end the results were used to create correlation models and statistical models of PCA (principal component analysis) methods with CA (correlation analysis).

KLÍČOVÁ SLOVA

Půdy, FTIR, NIR, spektra

KEY WORDS

Soil, FTIR, NIR, spectra

NAWRATH, Pavel. *Forenzní analýza půdy metodami FTIR a NIR s multivariační analýzou*. Brno, 2020. Dostupné také z: <https://www.vutbr.cz/studenti/zav-prace/detail/124000>. Diplomová práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav chemie a technologie ochrany životního prostředí. Vedoucí práce Helena Doležalová Weissmannová.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracoval samostatně a všechny použité literární zdroje jsem správně a úplně citoval. Diplomová práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a ke komerčním účelům může být využita jen se souhlasem vedoucího diplomové práce a děkana FCH VUT.

.....

podpis studenta

PODĚKOVÁNÍ

Chtěl bych poděkovat Mgr. Heleně Doležalové Weissmannové, Ph.D. za její čas, odborné vedení a cenné připomínky při vypracování této diplomové práce. Dále chci poděkovat rodině za jejich rady a trpělivost během psaní mé práce. Poděkování patří také mým přátelům za jejich obrovskou podporu při studiu.

OBSAH

1	Úvod.....	7
2	Teoretická část.....	8
2.1	Moravskoslezský kraj	8
2.1.1	Ostrava.....	8
2.1.2	Liberty Ostrava	8
2.1.3	Třinec.....	9
2.1.4	Třinecké železářny.....	10
2.1.5	Současný stav v Moravskoslezském kraji	10
2.2	Půda.....	13
2.2.1	Utváření půdy	14
2.2.2	Klasifikace půd	15
2.2.3	Struktura půdy	16
2.2.4	Kationtová výměnná kapacita (KVK)	17
2.2.5	pH půdy	17
2.3	Analýza půd metodami FTIR.....	18
2.3.1	Metoda DRIFT	19
2.3.2	Aplikování metod v praxi	20
3	Experimentální část.....	23
3.1	Vzorkování.....	23
3.1.1	Způsob odběru	25
3.2	Úprava vzorku.....	25
3.3	Stanovení sušiny	25
3.4	Stanovení pH.....	25
3.5	Stanovení kationtové výměnné kapacity (KVK)	25
3.5.1	Stanovení potenciální hydrolytické půdní reakcí (Ha)	26
3.5.2	Stanovení okamžitého obsahu výměnných bazických kationtů (S)	26
3.6	Převedení vzorku do roztoku	26
3.6.1	Sekvenční extrakce BCR	26

3.6.2	Totální rozklad.....	27
3.7	Stanovení rtuti.....	27
3.8	Stanovení vybraných kovů.....	28
3.8.1	Kalibrační křivky.....	29
3.9	Měření IČ.....	33
3.10	Použité chemikálie.....	33
3.11	Použité zařízení a pomůcky.....	34
4	Výsledky a diskuze.....	35
4.1	Vyhodnocení stanovení pH.....	35
4.2	Vyhodnocení stanovení kationtové výměnné kapacity (KVK).....	36
4.3	Vyhodnocení stanovení rtuti.....	38
4.4	Vyhodnocení vybraných kovů.....	39
4.4.1	Vyhodnocení stanovení chromu.....	39
4.4.2	Vyhodnocení stanovení manganu.....	40
4.4.3	Vyhodnocení stanovení mědi.....	41
4.4.4	Vyhodnocení stanovení niklu.....	42
4.4.5	Vyhodnocení stanovení olova.....	43
4.4.6	Vyhodnocení stanovení zinku.....	44
4.5	Vyhodnocení měření IČ.....	45
4.5.1	Vyhodnocení korelačních modelů.....	47
4.6	Analýza hlavních komponent (PCA) a klastrová analýza (CA).....	51
5	Závěr.....	54
6	Seznam použitých zdrojů.....	56
7	Seznam použitých zkratk a symbolů.....	60
8	Seznam příloh.....	61
9	Přílohy.....	62

1 ÚVOD

V posledních letech bylo publikováno mnoho studií zabývajících se nekonvenčními technikami analýzy půd. Infračervená spektrometrie má výhody v tom, že analýza půdy je rychlejší a levnější. Je tedy efektivnější v případě, kdy je potřeba analyzovat větší množství vzorků. Z tohoto důvodu se může nyní situace ve světě, kdy je potřeba provádět čím dál tím více analýz, využitím metod IČ spektrometrie značně ulehčit. Metody FTIR poskytují také citlivou charakterizaci minerálních či organických složek půdy, které se využívají pro kvalitativní, ale i kvantitativní analýzu.

Díky univerzálnosti může být IČ spektrometrie základem pro interpretaci neznámých spekter v matematických nebo statistických modelech, které se využívají pro tvorbu predikčních modelů. Tyto poznatky by mohly být dále užitečné při forenzním vyšetřování, které by sloužily jako základ k identifikaci původu u vzorků půdy.

Cílem této práce bylo vypracování literární rešerše zaměřené na oblast analýzy půd metodami FTIR. Dále ze zadaných lokalit odebrat vzorky půd a upravit dle potřeb metod analýzy FTIR. V neposlední řadě bylo cílem práce pokusit se nalézt vztah (korelaci) mezi výsledky FTIR analýzy a dalšími proměnnými (např. obsahy kovů v půdách). Nakonec výsledky patřičně interpretovat a zhodnotit pomocí korelačních či statistických modelů.

2 TEORETICKÁ ČÁST

2.1 Moravskoslezský kraj

2.1.1 Ostrava

Ostrava je svým celkovým počtem obyvatel třetím největším městem České republiky a je metropolí Moravskoslezského kraje. Nachází se 50 kilometrů západně od hranic Slovenska a 10 kilometrů jižně od hranic s Polskem, což zaručuje výhodnou strategickou polohu. Nejbližšími velkými městy jsou Brno a Katowice. Ostrava je od hlavního města Prahy vzdálená 360 kilometrů. Přibližně se stejnou vzdáleností se také dostaneme do dalších hlavních měst sousedních států, jimiž jsou Bratislava a Vídeň. Do města se vlévají čtyři řeky: Odra, Opava, Ostravice a Lučina [1].

Jedná se o klíčový komunikační a dopravní uzel Slezska a Moravy. Ostravou vede dálnice D1 a 25 kilometrů od Ostravy se vyskytuje také mezinárodní letiště Leoše Janáčka Ostrava. Město zajišťuje páteřní železniční tratě a oplývá hustou městskou dopravou s autobusovými, trolejbusovými i tramvajovými linkami. Během posledních let město Ostrava utvrdila své ekonomické místo ve střední Evropě. Chlubí se mnoha novými pracovními pozicemi i v netradičních oborech od automobilového průmyslu až po IT technologie. Vzdělání zajišťuje Ostravská univerzita a Technická univerzita Ostrava – Vysoká škola báňská, která je dle žebříčků nejlepší univerzitou ve střední Evropě. Ostrava podporuje i společenské a kulturní vyžití svými místními divadly, respektovanými galeriemi výtvarného umění a pestrou škálou výstav. Nesmíme zapomenout na sportovní či turistické akce a celosvětově proslulé festivaly jako například Colours of Ostrava, který do Ostravy přiláká tisíce návštěvníků nejen z České republiky, ale také ze zahraničí [2].

2.1.2 Liberty Ostrava

Hutnická společnost patří do skupiny Liberty Steel, jež je globální skupina zabývající se těžbou a výrobou oceli. Tato skupina zaměstnává dohromady přes třicet tisíc zaměstnanců na šesti kontinentech světa. Samotná akciová společnost zaměstnává šest tisíc pracovníků, čímž významně podporuje zaměstnanost v kraji. Průměrný měsíční výdělek pracovníků v roce 2018 se pohyboval kolem 39 tisíc korun českých. Společnost ročně vyrobí přes 2 miliony tun oceli, která se následně využívá v oblasti strojírenství a stavebnictví. Kromě dodávání svých výrobků na český trh, Liberty Ostrava a.s. dodává také do více než 40 zemí světa. Je proslulá také jako největší výrobce trubek a silničních svodidel v Česku.

Společnost je rozdělena na vícero závodů, z čehož jeden a půl milionu tun koksu ročně produkuje tři koksárenské baterie v závodě Koksovna. Je tak největším výrobcem koksu v České republice. Současně se při výrobě koksu produkuje další užitečné vedlejší produkty: surový černouhelný dehet, surový koksárenský benzol, koksárenský plyn a kapalná síra. Dalším závodem, jenž má na starost výrobu surového železa, jsou Vysoké pece, které jsou schopné vyprodukovat přes dva miliony tun produktu za rok. Převážná část putuje na další závod Ocelárna, který je rovněž největším výrobcem oceli v Česku s objemem výroby přes tři

miliony tun ročně. Proces probíhá kyslíkovým pochodem ve čtyřech tandemových pecích. Následně se ocel po odpichu dohotovuje tak, aby splňovala požadované parametry zákazníků a zároveň certifikací [3].



Obr. č. 1: Snímek areálu Liberty Ostrava [4]

Společnost je po dobu svého provozu významným znečišťovatelem životního prostředí. V březnu roku 2009 bylo krajským úřadem Moravskoslezského kraje nařízeno, že firma musí výrazně snížit emise ze závodu. Do roku 2014 mělo dojít ke snížení emisí oxidu siřičitého, oxidů dusíku a tuhých znečišťujících látek. Nově nainstalované modernější tkaninové filtry zachytí až o 70 % více prachových částic, čímž se snížila roční emise o 270 tun. Tato modernizace snížila emise až na hodnoty pod 1 tunu ročně, což splňovalo tehdejší emisní limity. Díky další modernizaci provozů společnost Liberty Ostrava a.s. splňuje zpřísněné limity a dodržuje díky vyvíjející se technice veškerou platnou legislativu [5-7].

2.1.3 Třinec

Průmyslové město Třinec se nachází v Moravskoslezském kraji, zhruba 30 kilometrů jihovýchodně od Ostravy a pojímá přes 35 tisíc obyvatel. V Česku je po Jablunkově Třinec druhým nejvýchodnějším městem. Třinec je bezpochyby nejvíce proslulý díky významnému českému výrobcí ocelových produktů, Třinecké železárně. Městem protéká směrem na sever řeka Olše. Ta od sebe odděluje dvě karpatská pohoří Moravskoslezské Beskydy a směrem na východ nižší Slezské Beskydy. Během léta i zimy město láká turisty do malebných údolí. Na Javorovém vrchu se nachází lyžařský areál, ve kterém se nachází sedačková lanovka

s celoročním provozem a sjezdovkami pro začátečníky, ale i zkušenější lyžaře. Zajímavostí města je souvislost s náboženstvím. Při sčítání lidu v 2011 s 60,5 % nábožensky přihlášenými obyvateli se Třinec dostal na pozici nejreligióznějších měst v ČR, avšak nesmíme opomenout, že skladba věřících je velmi pestrá. V oblasti sportu je znám také díky hokejovému klubu Oceláři Třinec, jež hraje nejvyšší soutěž České republiky [8].

2.1.4 Třinecké železářny

Třinecké železářny, u místních taktéž známé jako Werk (německy továrna), byly založeny už v roce 1839 v období Těšínské komory, pod vládou Karla Habsburského. Strategická poloha, která poskytovala jak dobrou dostupnost vstupních materiálů, tak i napojení na železniční dráhu Košice-Bohumín, ale i pracovní sílu, ovlivnila rozmach a soustředění hutních provozů z okolí právě do Třince. Díky modernizaci a zvětšování komplexu patřily Třinecké železářny k nejmodernějším hutním závodům s uzavřeným hutním výrobním cyklem ve střední Evropě. Ochranná známka „tři kladiva v kruhu“, kterou uvidíme na všech hutních výrobcích dodnes, pochází právě z období rozvoje ve 20. letech 20. století. Svého vrcholu podnik dosáhl v 80. letech 20. století, kdy vedle rostoucí produkce oceli a válcového materiálu byl kladen důraz na zavádění modernějších technologií. Dodnes je 95 % vyrobené oceli kontinuálně odléváno z kyslíkových konvertorů nebo elektrických obloukových pecí. Nyní jsou Třinecké železářny součástí společností skupiny Moravia Steel, pod kterou patří další v tomto oboru úzce spjaté podniky, jako např.: slévárny, kovárny, řetězárny, šroubárny, drátovny a mnoho dalších. Takto významný hutní podnik se stal důležitým prvkem regionu a dokázal tak proměnit drobné zemědělské obce ve veliké město [9].

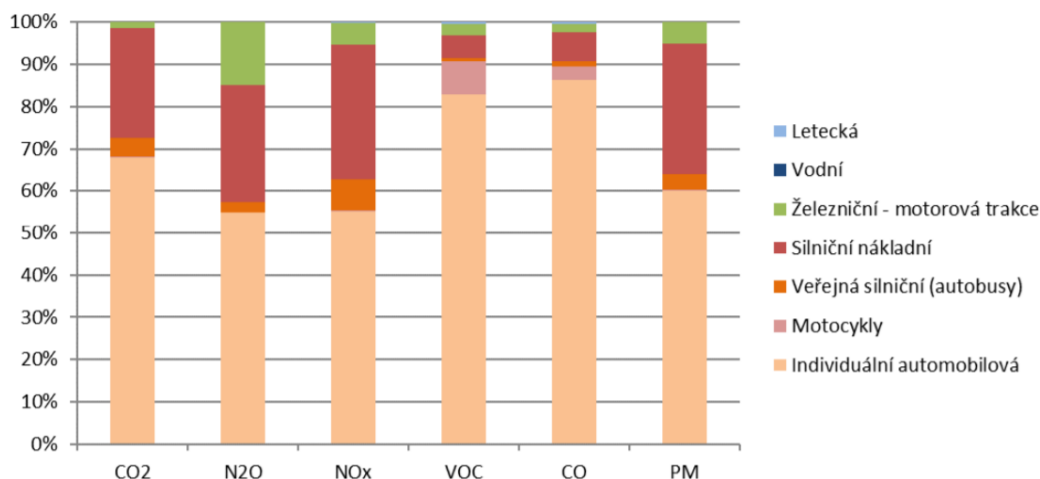
2.1.5 Současný stav v Moravskoslezském kraji

2.1.5.1 *Ovzduší a emise*

Emisní situace v období 2008 až 2018 v Moravskoslezském kraji kolísala, ale meziročně emise mírně klesaly. V případě emisí oxidů dusíku, oxidu siřičitého a tuhých znečišťujících látek (TZL) byl zaznamenán významný pokles a to zhruba o 35 %. Největším producentem TZL v kraji jsou stacionární zdroje (72,1 %), do které se řadí i vytápění domácností. U emisí oxidu uhelnatého hrály velkou roli především velké stacionární zdroje, což odpovídá energetickým a průmyslovým provozům, které dosáhly až k 71,5 %. V České republice se Moravskoslezský kraj řadí na druhou pozici s téměř 4krát vyšší zátěží, než je celorepublikový průměr. Velké stacionární zdroje vedou rovněž v emisích oxidů dusíku (65,2 %) a oxidu siřičitého (88,9 %). V produkci emisí amoniaku má v kraji znatelnou míru zemědělská činnost a chov hospodářských zvířat (96,1 %). V případě výroby a používání organických rozpouštědel vznikají emise těkavých organických látek (VOC) a to na 85,2 %. Kvalitou ovzduší je na tom Moravskoslezský kraj nejhůře v celé České republice. Na tuto kvalitu mají vliv i meteorologické podmínky, kterým se situace neulehčuje ani kvůli morfologii terénu a uzavřenosti Ostravské pánve. Samozřejmě v kraji je vysoká koncentrace průmyslu a to jak na české, tak na polské straně (přenos znečištění přes hranice). V neposlední řadě nesmíme

zapomenout na významnou dopravní zátěž. V roce 2018 došlo k překročení imisních limitů pro PM_{10} ($40 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) pro celou ČR na třech stanicích, přičemž dvě se nachází právě v Moravskoslezském kraji. Za situace imisního limitu pro 24hodinovou koncentraci PM_{10} ($50 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$), kdy maximální povolené překročení je 35krát za rok, byl limit v kraji překročen na 24 stanicích. Předěšlý rok byl limit překročen jen na 22 stanicích. U částic $PM_{2,5}$ ($25 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$) došlo k meziročnímu nárůstu počtů stanic o 3 až na počet 13, přičemž celorepublikově se všechny nalézají v Moravskoslezském kraji. V kraji se rovněž překročil roční imisní limit pro benzo(a)pyren ($1 \text{ ng}\cdot\text{m}^{-3}$) ve 14 lokalitách (o 2 více než v roce předešlém) a jednou pro benzen, který má roční imisní limit stanoven na $5 \mu\text{g}\cdot\text{m}^{-3}$.

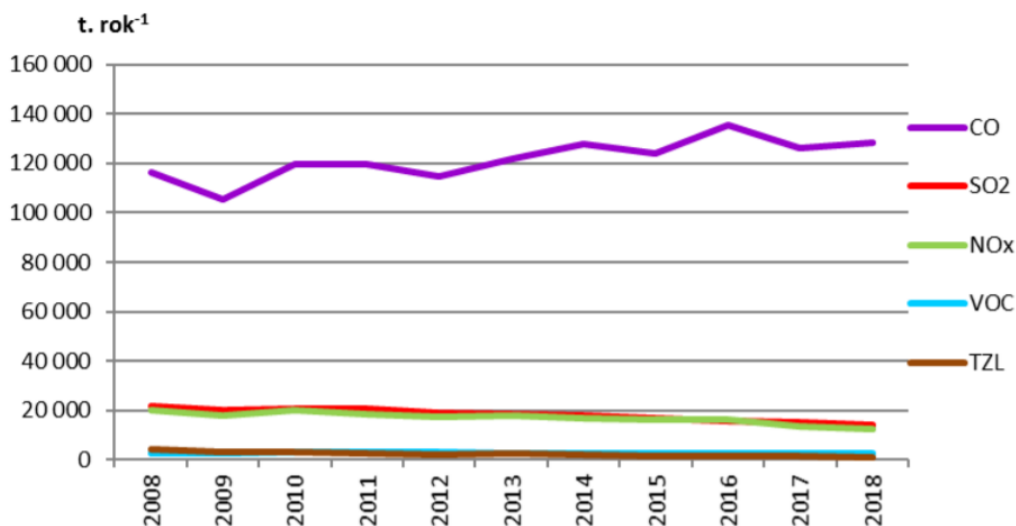
V zimních měsících narůstají emise úměrně vzhledem k chladnějšímu počasí. V kraji, který má vysokou hustotu obyvatelstva, jsou sledovány nadprůměrné hodnoty emisí z vytápění domácností oproti průměru celé ČR. V méně dostupných obcích se využívá individuální vytápění jednotlivých domů či bytových jednotek oproti větším aglomeracím a ve městech, kde se využívá zbytkové teplo z blízkých průmyslových zařízení (tzv. dálkové vytápění). Dálkové vytápění a topení zemním plynem představuje valnou většinu způsobů vytápění (79,4 %) s relativně příznivým dopadem na životní prostředí, avšak u podílu tuhých paliv (jako je uhlí a dřevo) hraje ve výběru velkou roli cena paliva. Nižší cena láká více zákazníků, ale často klesá kvalita paliva. Obyvatelé se tak v důsledku šetření vrací k neekologickým a méně příznivým druhům paliv, což nakonec hraje značnou roli v emisní situaci kraje. Na druhou stranu, zejména v aglomeracích, měl kraj značnou emisní zátěž způsobenou dopravou, která se podílí na celkové neuspokojivé kvalitě ovzduší. Po hlavním městě Praze se kraj umístil na druhé příčce v ČR s celkovou měrnou emisí oxidů dusíku na jednotku plochy s 8,9 %. V této struktuře emisí dle druhu dopravy zaujímá větší podíl individuální automobilová doprava, která dosahovala přes 80 % u celkových emisí oxidu uhelnatého a emisí VOC. V případě emisí oxidů dusíku se hodnota pohybovala kolem 55 % a u oxidu uhličitého skoro 70 %. Druhý největší podíl představovaly v roce 2018 emise tvořené nákladní silniční dopravou následovanou již nepatrnými hodnotami sledovanými u železniční dopravy. Avšak z dlouhodobého hlediska (období 2000-2018) je trend emisí z dopravy klesající a to i přes významný růst intenzity silniční dopravy. Díky technologickému vývoji a modernizaci vozového parku, zejména u náročnějších dieselových motorů, se emisní příspěvek snížil. Bohužel u jedné položky byl za sledované období vyzorován rostoucí trend, který rovněž souvisí s růstem spotřeby energie a paliv v dopravě. Jedná se o emise oxidu uhličitého, které za 18 let vzrostly o 63,1 % [10].



Graf č. 1: Struktura emisí znečišťujících látek z dopravy v kraji roku 2018 [11]

2.1.5.2 Průmysl

Moravskoslezský kraj patří k nejdůležitějším průmyslovým oblastem ve střední Evropě. Významné jsou ložiska černého uhlí v Ostravsko-karvinské pánvi, které úzce souvisí s hutním průmyslem. Těžba stavebních surovin jako je vápenec, šterkopísky a stavební kámen kolísá v závislosti na stavební výrobě a tudíž i na stavu ekonomiky v zemi. Naproti tomu objemy těžby černého uhlí a ostatních průmyslově využívaných surovin v důsledku dlouhodobého trendu utlumování těžby klesají. Historicky byl v kraji díky ložiskům nerostných surovin soustředěn těžký průmysl a to především průmysl hutní a na něj navazující výroby. Podniky jsou často umístěny v blízkosti řek Odry, Ostravice a Moravice, obzvláště pak v okolí měst Ostravy a Frýdku-Místku. Celkem 151 průmyslových zařízení v roce 2018 spadá do oblasti Moravskoslezského kraje. Z kategorie energetiky, kde se řadí teplárny, výtopny, ale i čtyři zařízení na výrobu koksu, je provozováno celkem 19 zařízení. Dále zařízení typu železárny, slévárny, ocelárny, válcovny společně s dalšími zařízeními na zpracování nerostných materiálů (např. výroby žáruvzdorných keramických materiálů, tavení nerostných materiálů či zpracování vápence) se v kraji vyskytuje 52 zařízení. Dalších 13 podniků spadá pod kategorii chemického průmyslu. Jedná se o farmaceutické firmy a výroby anorganických i organických chemikálií, lepidel nebo výplní do autosedaček. 31 zařízení v kraji zastupuje kategorii pro nakládání s odpady a jsou to skládky, čistírny odpadních vod (ČOV), ale také dekontaminační plochy. Zbylé provozovny jsou v kategorii ostatních průmyslových činností (potravinářské a zemědělské podniky, výroba buničiny a papíru, lakovny a další). V důsledku soustředění průmyslu vzniká značné množství znečišťujících látek. Hlavně se jedná o emise oxidu uhelnatého, kdy většina pochází právě ze zařízení na zpracování železa a oceli v Ostravě a Trinci. Díky nepřetržitému zlepšování technologií a pečlivému dodržování emisních limitů s důrazem na zlepšení životního prostředí, ale také z důvodu zvýšení průmyslové výroby po překonání ekonomické krize, se nepodařilo za měřené období emise snižovat.



Graf č. 2: Emise z průmyslových zdrojů (REZZO 1 + REZZO 2) v kraji [11]

Průmyslová a důlní činnost rovněž negativně ovlivňuje jakost vod Moravskoslezského kraje. Bývá to hlavně řadou úniků do vod, především z ČOV, výroby železa a souvisejících provozů. Z dlouhodobého hlediska se stav znečištění toků zlepšuje a to zejména v úseku toků Lučina a Lubina, kde došlo v letech 2017-2018 ke zlepšení ze třídy velmi silně znečištěné vody na třídu silně znečištěnou. Musí se podotknout i fakt, že podíl obyvatel připojených ke kanalizaci byl v roce 2018 podprůměrný (83,1 %), a zároveň i podíl obyvatel s napojenou kanalizací na ČOV, který činil jen 77,3 %. Dohromady je na území Moravskoslezského kraje v provozu 164 ČOV, z nichž má větší polovina terciární stupeň čištění. Jedná se tak o mírný nadprůměr [10].

2.2 Půda

Půda je obecně volná porézní směs materiálů, jejíž porozita je výsledkem agregace organických anebo anorganických půdních částic, které na většině zemského povrchu tvoří nejsvrchnější vrstvu zemské kůry. Vzniká reakcí na okolní fyzikální, chemické a biologické podmínky působící na organické zbytky, geologické materiály a antropogeomorfní produkty a je náchylná na erozi větrem, vodou, ledem či organismy. Složkami půdy jsou krystalické a amorfni anorganické pevné fáze, zejména aluminosilikáty, hydroxidy železa, uhličitany a organické materiály živé i mrtvé, z nichž má mikrobiální biomasa zásadní význam. Dále také vodné roztoky anorganických i organických komplexů, obvykle dostatečně zředěné vodou a nakonec i plynná fáze, která obsahuje obvyklé molekuly pocházející z chemických a biochemických reakcí, jako je dýchání, organický rozklad či interakce s vodou. Půda podléhá neustálým dynamickým změnám, za co může především obsah vody. Gravitační pohyb vody v půdě ovlivňuje transport pevných částic a rozpuštěných látek směrem dolů, zatímco díky sluneční energii se složky koncentrují na povrchu odpařováním přímo anebo nepřímo pomocí

roślin, což za relativně krátkou dobu vytváří vertikální diferenciaci, rozdělující půdu na několik tzv. půdních horizontů [12].

2.2.1 Utváření půdy

Tvorba půdy začíná fyzikálním a chemickým rozkladem zemských hornin způsobeným atmosférickými činiteli. Tento proces známe pod pojmem zvětrávání, kdy odštěpující se fragmenty hornin vytváří své nové fyzikální a chemické vlastnosti. Proces může rovněž produkovat další minerály, které jsou nezbytné pro další vývoj a tvorbu půdy. Zdánlivě slabé síly počasí jednájí pomalu, avšak neúprosně a působí rozložení silných a masivních skalních podloží, jakými jsou žula a čedič. Zvětrávání zahrnuje dvě hlavní trasy, fyzický a chemický rozklad, kdy tyto procesy probíhají na mateční hornině současně, ale každý rozklad působí odlišně a vytváří tak rozpoznatelné vlastnosti. Fyzické procesy postupně rozkládají výchozí materiál na menší kousky a nakonec až na částice písku, hlíny a jílu. Převládají v suchém a chladném prostředí, kde zahřívání a chlazení exponovaných hornin způsobuje fyzický stres a praskání. Jiné formy fyzického zvětrávání pocházejí z oděru vodou, ledem nebo větrem a jsou stejně významné pro původ půd. Například některé z nejproduktivnějších půd na světě se nacházejí v říčních údolích. Rostoucí kořeny pronikají trhlinami vytvořenými např. ledem a vyvíjí silný tlak, který dále rozděluje horninu posléze unášenou vodou, ledem či větrem. Současně s fyzickým rozkladem uvolňují chemické procesy rozpustné materiály a minerály. Chemická forma zvětrávání mění strukturu matečního materiálu chemickými reakcemi. Na rozdíl od fyzického rozkladu je chemický rozklad výraznější v teplých a vlhkých klimatických oblastech. Tato forma zvětrávání je ovlivňována geologickými a biologickými procesy, a proto je také známá jako biogeochemické zvětrávání.

Voda je nezbytnou součástí každé z těchto forem chemických reakcí, které zahrnují hydrataci, při níž se molekuly vody vážou na minerály. Dále hydrolyzu, kdy se molekula vody štěpí a vodíkový kation nahradí kation z minerální struktury. Zahrnuje i procesy alkalizace, acidifikace a oxidační redukce, ke kterým dochází u půd obsahující železo, mangan a síru, kdy jsou ovlivněny ztrátou nebo získáním elektronu. K selektivnímu odstranění různých složek dochází rozpouštěním, vyluhováním, srážením nebo těkáním. Ačkoli některé primární minerály přítomné v podloží jsou relativně stabilní a zachovávají si svůj původní charakter (např. křemen), jiné minerály jsou poměrně reaktivní (např. živce a slídy). Tyto minerály se postupně rozkládají a jsou rekonstruovány do sekundárních minerálů tvořené v půdě, zejména se jedná o dominantní skupinu jílu. Úplný vývoj půdy může trvat mnoho století až tisíciletí a příměs jednotlivých fragmentů různých velikostí, tvarů a kompozic s různým uspořádáním má za následek vytvoření obrovské škály druhů půd rozdělujících se do mnoha typů kategorií [13, 14].

2.2.2 Klasifikace půd

V České republice byly na celém území systematické průzkumy půdy ve velkém měřítku dokončeny v 60. letech, s výjimkou urbanizovaných oblastí. Protože bylo mapování zemědělských a lesních půd prováděno dvěma institucemi, došlo k určitým rozdílům v přístupu mapování a v klasifikaci půdy. Hlavními problémy byly vypracovat návrh systému, který by odrážel potřeby vědy o půdě, taxonomicky oddělit lesní a zemědělsky využívanou půdu na jednu úroveň od půd ekologicky důležitějších, které by patřily na odlišnou úroveň a rovněž navrhnout klasifikaci antropogenních půd s rozlišnými vlastnostmi ovlivněnými činnostmi člověka. Nicméně na začátku století byl dokončen jednotný český taxonomický systém klasifikace půdy. Jedná se o multi-kategorický systém, který odráží výsledky dlouhodobého vývoje půdy. Půdní typy a subtypy společně s hlavní referenční třídou, která představuje spojení nejvyšších taxonomických kategorií světových referenčních systémů, vyřešily jednotnou klasifikaci lesnické a zemědělsky využívaných půd. Nastal problém u nově publikovaných odborných článků v angličtině, které si vyžadovaly převod do již uvedených světových systémů, kterým byl světový referenční systém WRB (ISSS-ISRIC-FAO 1998) či americká nomenklatura (USDA-NRCS 1999) při publikování ve Spojených státech amerických [15, 16].

Skupiny půdních typů a půdní typy ČR 2001		WRB: IUSS/FAO/ISRIC 1998	Soil taxonomy 1999	
LEPTOSOLY	litozem (LI) ranker (RN) rendzina (RZ) pararendzina (PR)	lithic Leptosols (LP) Leptosols (LP) rendzic Leptosols (LP) Leptosols (LP)	ENTISOLS	...ents
REGOSOLY	regozem (RG)	Regosols (RG) Arenosols (AR)		Psamments
FLUVISOLY	fluvizem (FL) koluvizem (KO)	Fluvisols (FL)		Fluvents
VERTISOLY	smonice (SM)	Vertisols (VR)	VERTISOLS	
ČERNOSOLY	černoze (CE) černice (CC)	Chernozems (CH) Phaeozems (PH)	MOLLISOLS	Ustolls Udolls
LUVISOLY	šedoze (SE) hnědoze (HN) luzem (LU)	gleyic Phaeozems (gz PH) haplic Luvisols (ha LV) Albeluvisols (AB)	ALFISOLS	
KAMBISOLY	kambize (KA) pelozem (PE)	Cambisols (CM)	INCEPTISOLS	
PODZOLY	kryptopodzol (KP) podzol (PZ)	entic Podzols (et PZ) haplic Podzols (ha PZ)	SPODOSOLS	
STAGNOSOLY	pseudoglej (PG) stagnoglej (SG)	...Stagnosols gleyic Stagnosols Planosols	aquic...	
GLEJSOLY	glej (GL)	Gleysols (GL)	AQU...s	
ORGANOSOLY	organozem (OR)	Histosols (HS)	HISTOSOLS	
ANTHROPOSOLY	kultize (KT) anthrozem (AN)	Anthrosols (AT)		

Tab. č. 1: Skupiny hlavních půdních typů [16]

modální	haplic	
	calcaric	} variety podle obsahu karbonátů a nasycenosti
	eutric	
	dystric	
	calcic (pouze u černozemi)	
dystrická	hyperdystric (u kambizemi)	
kambická (-ý)	cambic	
luvická (-ý)	luvic, u hnědozemí albic	
podzolovaná	spodic (pouze varieta)	
rubifikovaná	chromic	
melanická	mollic	
umbrická (-ý)	umbric	
fluvická (-ý)	fluvic	
oglejená (-ý)	stagnic	
glejová (-ý)	gleyic	
histický	histic	
fibrická	fibric	
saprická	sapric	
arenická (-ý)	arenic	
vertická (-ý)	vertic	
pelická (-ý)	pelic	
rankerová (-ý)	skeletalic	
litická (-ý)	lithic	
antropická (-ý)	antropic	

Tab. č. 2: *Názvy subtypů v obecné formě [16]*

2.2.3 Struktura půdy

Pevná fáze půdy se skládá hlavně z minerálních částic. Malé, ale významné množství zaujímá amorfni materiál včetně organické hmoty. Částice nejsou přesně kulovitého tvaru a dost se svým tvarem liší. Proto jsou tyto částice obvykle klasifikovány do tří pohodlně oddělitelných skupin podle určitého rozsahu velikosti na základě jejich ekvivalentního průměru. Skupiny částic o různé velikosti jsou známé jako písek, hlína a jílu. Struktura půdy je definována jak kvalitativně, tak kvantitativně. Kvalitativní struktura se týká povrchu půdy, kdy může být hrubá a drsná nebo jemná a hladká. Kvantitativně je struktura půdy vztažena jako relativní podíl písku, hlíny a jílu v závislosti na hmotnosti. Termín struktura půdy se často používá zaměnitelně se složením půdy. Schopnost využití půdy pro hospodářské účely do značné míry souvisí na její struktuře. Na světě existuje několik systémů pro klasifikaci půdních částic. V tomto případě uvedeme široce používaný systém Mezinárodní unie o půdních vědách (IUSS). Částice půdy o průměru větší než 2 mm (částice šterku a kamenů) nejsou do klasifikace zahrnuty, jelikož velké částice mohou způsobovat problémy při zpracování půdy a ani podstatně nepřispívají k důležitým vlastnostem půdy. Částice od rozměru 2 mm do 0,2 mm se řadí jako hrubý písek. Jemnému písku náleží rozměry od 0,2 mm do 0,02 mm. Posun rozměru o další desetinu patří částicím hlíny a jílovité částice zastávají skupinu s rozměry menší jak 0,002 mm. Kromě toho se částice písku a hlíny sestávají z primárních minerálů, jako je křemen, živce a slída, zatímco částice jílu jsou tvořeny hlavně ze sekundárních minerálů, jako je kaolinit, ilit, vermikulit, montmorilonit, chlorit, a hydratované oxidy železa a hliníku. Typickou vlastností písku je nízká kapacita zadržování

vody a živin společně s nízkou lepivostí a plasticitou za mokra. Jejich částice lze také snadno vidět pouhým okem a na dotek jsou často drsné. Opačné vlastnosti má jíl, který je navíc za sucha tvrdý a jeho částice lze pozorovat pouze elektronovým mikroskopem. Průměrné vlastnosti těchto dvou zástupců přísluší částicím hlíny. Částice písku a šterku jsou většinou chemicky neaktivní, ale jemné jíly mohou ovlivnit chemii půd a působit jako zdroj živin pro kořeny rostlin [17-19].

2.2.4 Kationtová výměnná kapacita (KVK)

KVK (angl. CEC) vyjadřuje potenciální množství snadno vyměnitelných kationtů, které jsou schopné návaznosti na negativní náboje půdy. Z tohoto důvodu se tyto kationty často nazývají jako vyměnitelné a jedná se o kationty vápenaté, hořečnaté, sodné a draselné. Je také nedílnou charakteristikou a velmi důležitou vlastností pro půdu a je obtížné ji významně změnit. Negativní elektrické náboje v půdních složkách lze odvodit z izomorfních částic jílovitých minerálů a oxyhydroxidů. V minerálních půdách je původ povrchových nábojů více spojen s primárními nebo sekundárními minerály ve vztahu s procesy zvětrávání, které způsobují úplné nebo částečné rozpuštění minerálů, což má za následek vytvoření nových reakčních míst anebo vysrážení úplně nové fáze. Amorfni fáze obvykle vykazují vysoké hodnoty povrchového náboje oproti krystalickým v důsledku poruchy atomů ve struktuře. Jílovité půdy mají na svém povrchu záporně nabitá místa, která adsorbují a drží kladně nabitě ionty elektrostatickou silou. Tento elektrický náboj je rozhodující pro dodávání živin rostlinám, protože mnoho živin existuje ve formě kationtů a lze tak konstatovat, že půdy s větším KVK jsou úrodnější. Půdy s vysokým obsahem organické složky mají také velmi vysoké hodnoty KVK. To vysvětluje, proč se KVK v půdách liší podle struktury (písčité, jílovité nebo organické půdy). Existují dva typy povrchových nábojů. Trvalé náboje, které nejsou ovlivněny změnami podmínek půdního roztoku i povahou volných iontových částic a variabilní náboje, které už změnami podmínek půdního roztoku ovlivňovány jsou. Stanovení KVK v půdách může být ovlivněno několika proměnnými. Některé jsou spojeny s vnitřními charakteristikami půdy jako je pH, povaha a koncentrace iontových částic, přítomnost rozpustných solí či typem a rozložením půdních částic, zatímco jiné jsou spjaty s laboratorní předúpravou vzorků. Jestliže dojde k nahrazení kyselými kationty, běžné metody vykazují mnohem vyšší hodnoty, než se vyskytuje v terénu. Tato výměnná kyselost musí být při počítání zahrnuta, aby bylo měření označeno jako korektní. Avšak správné stanovení KVK poskytuje cenné informace týkající se deficitu náboje v částicích půdy, dostupnost kationtů (i jako živin pro rostliny), ale lze také nepřímou použít k odvození jejího potenciálu pro zadržování nebo uvolňování znečišťujících látek v půdě [20-22].

2.2.5 pH půdy

Půdní pH ovlivňuje chemické, fyzikální a biologické vlastnosti půdy. Ovlivňuje také rozpustnost organického uhlíku a s klesajícím pH se zvyšuje dostupnost biologicky toxických kovů. Pro pochopení chemie půdního roztoku musíme brát v úvahu charakter a množství jeho

hlavních složek. Velkou roli hrají také acidobazické a redoxní reakce. Zjednodušeně se na tuto problematiku lze dívat jako na proudění látek z oblastí s vysokou koncentrací do oblastí s nízkou koncentrací. Kationty dodávané do půdy z atmosférických a organických zdrojů reagují s bázemi obsaženými v hlinitokřemičitanech, uhličitanech či s dalšími složkami obsaženými v dané půdě. Za situace vlhkého klimatu s nadměrnými srážkami a za určité doby se budou bazické kationty (sodné, draselné, vápenaté a hořečnaté) vyměňovat z přítomných složek půdy za protony H^+ a budou z půdy vyluhovány. Přítomnost vápenatých a jílových minerálů (např. smektity), které jsou nasyceny zásaditými ionty, zpomalují rychlost tohoto procesu acidifikace. Probíhající hydrolyza vede ke tvorbě minerálů jako je např. kaolinit. Zároveň se pH půdního roztoku dostane k rozmezí hodnot pH od 3,5 – 5. Situace je opačná v prostředí při polosuchých nebo za suchých podmínek, kdy se projevuje trend směřující k alkalické oblasti pH. Jestli je prostředí půdy kyselé nebo zásadité má rovněž vliv na aktivitu půdních enzymů. Je známo široké spektrum organických i anorganických kyselin v půdách, i když jsou tyto kyseliny většinou slabé. Měření pH půdního roztoku poskytuje důležitá data pro predikci potenciálních mikrobiálních reakcí a enzymatické aktivity v půdě. Avšak z důvodu heterogenity a různému rozpořádání iontů v zemině může být měření pH půd značně obtížné a hodnoty se tak mohou lišit dokonce i o 2 jednotky hodnoty pH. Funkce půdy jako pufru je závislá na konkrétních reakcích, které za daný okamžik probíhají. Můžou být okamžité, krátkodobé i dlouhodobé. Okamžité reakce jsou ty, s nimiž se setkáte v hodinách chemie. Jakmile se k silné bázi přidá silná kyselina, rovnováha se ustanoví téměř okamžitě, kdy omezením tohoto systému je rychlost difúze reaktantu. Výměna kationtů je také velmi rychlý proces, který je omezen přístupem roztoku k reakčním místům. Pokud jsou k dispozici malé póry, výměnné reakce mohou trvat déle a k ustanovení rovnováhy vyžadují i několik dní [23-25].

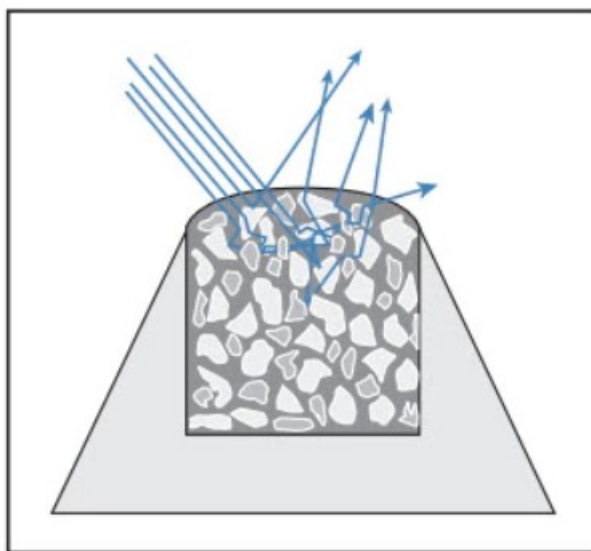
2.3 Analýza půd metodami FTIR

Infračervená spektrometrie má výhody oproti konvenčním technikám analýzy půdy v tom, že je rychlejší a levnější, a proto je výhodnější za situace, kdy je vyžadováno velké množství analýz [26, 27]. Techniky nevyžadují drahé a časově náročné předzpracování vzorků, u kterého se používají chemické extrakční látky často škodlivé pro životní prostředí [28]. Infračervené spektrum se běžně získává průchodem infračerveného záření vzorkem půdy a určováním toho, jaký podíl dopadajícího záření je absorbován při určité energii. Energie, při které se v absorpčním spektru objeví jakýkoli pík, odpovídá frekvenci vibrací části molekuly vzorku [29]. Vzorky půdy lze analyzovat pomocí FTIR spektrometrií různými metodami, z nichž nejčastější jsou ATR (zeslabená úplná reflektance) a DRIFT (difúzní reflektance). Ostatní metody poskytování infračervených spekter slouží pro doplnění hodnocení půdních složek a procesů. Transmisní spektrometrie byla v minulosti nejčastější metodou používanou ke sběru půdních spekter. Z důvodu náročné přípravy vzorků (rozemletí, smíchání s bromidem draselným a slisováním do pelet) a nutnosti vysušení vzorku se už transmisní spektrometrie však tak často nevyužívá. Metodou, která vyžaduje minimální přípravu vzorku, je právě DRIFT. Postačuje rovnoměrná homogenizace vzorku a její jemné namletí s velikostí

částic menší jak 900 μm . Špatně upravené vzorky s hrubšími částicemi mohou zachycovat záření účinněji než ty jemné, což by mělo za následek zvýšení rozptylu u spektra. Mohlo by dojít ke zvýšení absorbance, posunutí „baseline“ či změnám šířky píku. DRIFT lze provádět na čistých vzorcích nebo se vzorkem zředěným pomocí bromidu draselného. Zředění se používá z důvodu určení spektrální kvality nebo za případu, pokud je k dispozici malé množství vzorku. Nejnovější FTIR techniky jsou unikátní v poskytování přesných spekter vzorků s obsahem vody. Voda absorbuje ve střední oblasti infračerveného záření a jelikož v této oblasti dochází i k absorpci půdních složek, je tento faktor pro jiné metody limitující [30].

2.3.1 Metoda DRIFT

Princip této techniky je založen na rozptylu dopadajícího záření (na vzorky pevné či práškovité) do všech směrů. Část dopadajícího záření se odráží na povrchu látek a vytváří Fresnelovu reflektanci, zatímco další část prochází vzorkem, interaguje s ním a množí se v mnoha směrech. Absorpce a rozptyl záření vzorkem v mnoha směrech je znám jako difúzní reflektance [31]. Analýza DRIFT se provádí fokusací infračerveného paprsku na vzorek a jako rozptýlené se shromáždí na detektoru infračerveného záření. V praxi je DRIFT nejvýhodněji a nejrychleji používán pro analýzu půdy v režimu difúzního odrazu, kde je záření zaměřeno na povrch vzorku půdy (často ve formě prášku) a odražené záření se vrací zpět do spektrofotometru [32].



Obr. č. 2: *Infračervený paprsek interagující se vzorkem v experimentu difúzní reflektance [33]*

Spektra DRIFT podléhají nelineárnímu škálování intenzity, která snižuje intenzitu silně absorbujících pásů ve srovnání se slabšími pásy. Nakonec se tedy pásy s nízkou intenzitou

jeví ve spektrech lépe [34]. Kubelka a Munk přišli s teorií popisující proces difúzní reflektance vzorků, která se vztahuje na koncentraci vzorku s rozptýlenou intenzitou záření. Rovnice je následující:

$$\frac{(1 - R^2)}{2R} = \frac{c}{k},$$

kde R značí absolutní reflektanci vrstvy, c je koncentrace a k je molární absorpční koeficient. Alternativní vztah mezi koncentrací a intenzitou odrazu je v praxi hojně používán, a to:

$$\log(1/R) = k'c$$

[35, 36].

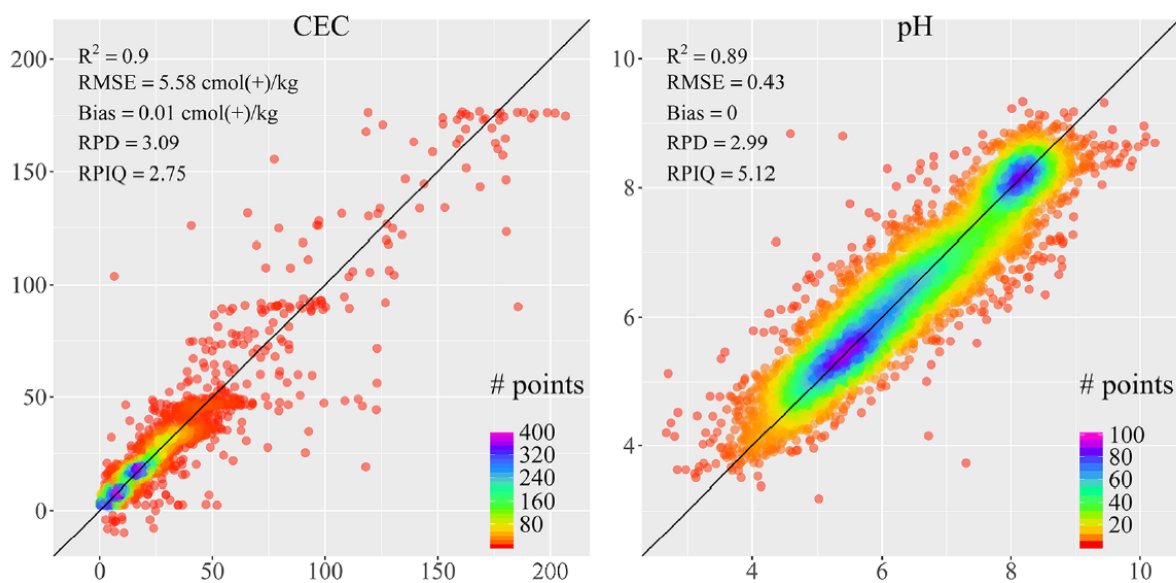
Geometrie struktur povrchů pevných vzorků půd byla zkoumána Leue a kolektivem. Pokusili se vyvinout přístup ke korekci následků geometrie povrchu. Cílem bylo analyzovat účinky velikosti částic, porozity a specifických tvarů pro porovnání intenzit signálů DRIFT. Spektra byla získána z různě tvarovaných vzorků křemene či sádrových bloků s definovanými tvary, které sloužily jako modely půdního porézního systému. Naměřené hodnoty intenzity signálu, rozlišení i simulované reflektance, klesaly se zvyšující se velikostí částic [37, 38].

2.3.2 Aplikování metod v praxi

Půdní živiny, jako jsou uhlík, dusík, fosfor, draslík, vápník či další mikroprvky, hrají důležitou roli ve vývoji zemědělských plodin, proto je určování jejich koncentrací rozhodující. Většina studií uvádí velmi dobré výsledky s korelačními koeficienty R^2 mezi skutečnými a odhadovanými hodnotami vyšší než 0,90. Výrazně horší výsledek měla studie z roku 2009 od Reeves & Smith. Jejich studie se neomezovala pouze na zemědělské půdy jako předchozí studie, ale zahrnovala vzorky půd z národních lesů, pastvin a dřevin. Dodali, že tak široká škála vzorků je odpovědná za špatné výsledky regresních modelů [39]. Přijatelnější výsledky byly pro odhady celkového dusíku ($R^2 > 0,80$) s použitím buď DRIFT nebo fotoakustické spektrometrie. Avšak pro dusičnany se žádné korelace mezi spektry DRIFT a koncentrací dusičnanů nenašly. Tyto výsledky jsou protikladem s výsledky dosaženými technikou ATR, u níž se typické chyby stanovení pohybují v rozmezí od 5 do 25 mg.kg⁻¹ [28]. Největší chyby stanovení odpovídají vápenatým zeminám, u nichž je stanovení stíněno absorpčním pásem uhličitánů, který překrývá dusičnanový pás [40]. U draslíku, fosforu a podílu organické hmoty se jednalo o protichůdné výsledky. Bertrand a kolektiv uvádí, že DRIFT lze použít k odhadu koncentrace draslíku. Vycházeli jim přijatelné výsledky R^2 , kdy se hodnota rovnala 0,85. Ostatní získali relativně špatné výsledky a dospěli k závěru, že DRIFT spektrometrie není na odhad koncentrace draslíku vhodná [41]. Pro fosfor uvedli Janik a kolektiv hodnotu R^2 0,87. Ostatní skupiny však vztah mezi spektry DRIFT a fosforem nenašly (hodnoty korelačních koeficientů se pohybovaly pod 0,40) [42]. Pro podíl organické hmoty byly získány velmi dobré výsledky s hodnotami R^2 vyššími než 0,90 ve všech třech studiích Masserschmidt a kolektivu. Naproti tomu velmi špatnou korelaci mezi spektry DRIFT a obsahem organických látek uvedli Canasveras a kolektiv [43, 44]. Poněkud

protichůdné výsledky uváděné v některých studiích DRIFT spektrometrie zdůrazňují potřebu standardizace a sjednocení analýz [34].

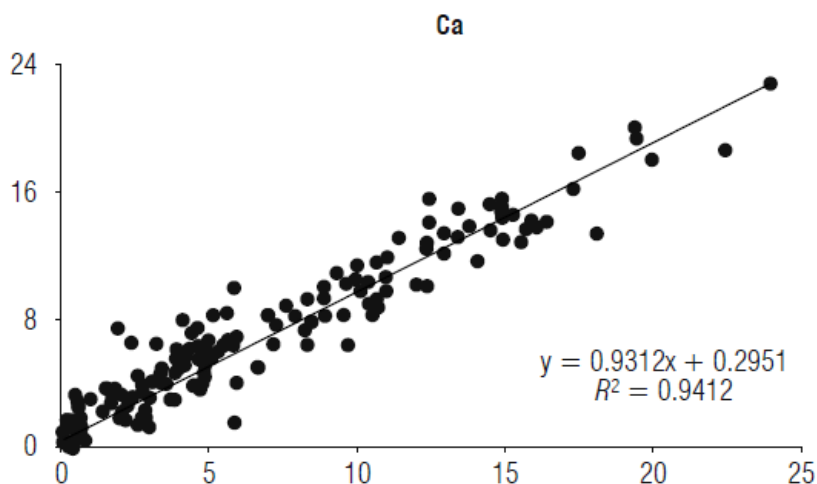
Americká studie, která studovala vzorky půd shromážděné za 17 let po celých Spojených státech, zahrnovala stanovení až dvanácti fyzikálních a chemických půdních vlastností, kde mimo jiné patřilo i stanovení kationtové výměnné kapacity. Cílem této práce nebylo pouze vytvoření spektrální knihovny na více než 20 000 vzorcích, ale také s pomocí této knihovny posoudit schopnost predikce vlastností tohoto obrovského množství vzorků. Modelování spekter bylo docíleno s kalibrací metodou regrese nejmenších čtverců (PLSR). PLSR je nejčastěji používanou technikou pro chemometrické modelování a v půdní spektrometrii je tato metoda vnímána jako standardní. Metoda nejmenších čtverců je bilineární modelovací postup, kdy proměnné (v tomto případě spektra) v grafu náleží ose X a osu Y lze popsat jako funkci prvků, např. hodnoty pH či koncentrace látek, pro predikci s nejmenším počtem latentních (predikčních) proměnných [45]. Výsledky ukázaly, že predikce u organického, anorganického i celkového uhlíku, celkového dusíku a síry vyšly nadmíru uspokojivě s R^2 přes 0,95 a pro hodnoty KVK a pH nad 0,89. U výsledků s fosforem a draslíkem byly opět dosaženy špatné predikce s $R^2 < 0,4$ [46].



Graf č. 3: Vizualizace modelů PLSR s proměnnou KVK (CEC) a pH [46]

I výsledky práce z Kolumbie poukazují, že technikami infračervené spektrometrie střední oblasti lze zpracovat velké množství vzorků, jejichž hodnoty poskytují významné informace různých parametrů a to v jednom spektru. Měření proběhlo s 312 vzorky půd různých druhů ze zemědělsky obdělávaných částí Kolumbie. Kalibrace modelů byla také provedena s metodikou PLSR a dle názoru kolektivu vykazovala lepší výsledky než vícenásobná lineární regrese. Nejlepších výsledků bylo dosaženo u organického uhlíku s vynikajícími hodnotami $R^2 = 0,94$. Podobný výsledek uvádí i Mouazen s kolektivem z roku 2010, kdy se hodnota

korelačního koeficientu blížila k 0,90 [47]. Dobré výsledky byly dosaženy i u korelací s hořčíkem a vápníkem, kdy se hodnota R^2 u vápníku blížila rovněž skoro 1, což označuje dokonalý predikční model [48, 49].



Graf č. 4: Korelace predikčních a změřených hodnot vlastností půdy pro vápník [49]

Další studie zabývající se průzkumem vlastností půd v Nanjing v Číně využila techniku DRIFT v pásmu od 4000 do 500 cm^{-1} pro vyhodnocení jednotlivých parametrů u více než 1400 vzorků. Výsledky ukázaly, že vlnové délky vybrané pomocí algoritmu používající SAM-PLS zlepšily přesnost predikce pro pH, obsah organické hmoty, celkového dusíku a dostupného fosforu. Tento vylepšený model byl vytvořen na základě PLSR, který navíc využíval výpočet relativní vzdálenosti mezi neznámým vzorkem a vzorkem z kalibračního datového souboru. Následně se vzorky vytřídily dle vzdálenosti od minima k maximu a byly podrobeny PLSR, kdy se pro každou kalibraci vytvořil samostatný model [50]. Kromě hodnot u predikce fosforu se korelační koeficienty pohybovaly nad 0,86. Tyto výsledky poukázaly na fakt, že vhodně vybrané vlnové délky predikční model zdokonalí, protože se tak do určité míry nepodstatným či rušivým vlnovým délkám vyhne [51].

3 EXPERIMENTÁLNÍ ČÁST

3.1 Vzorkování

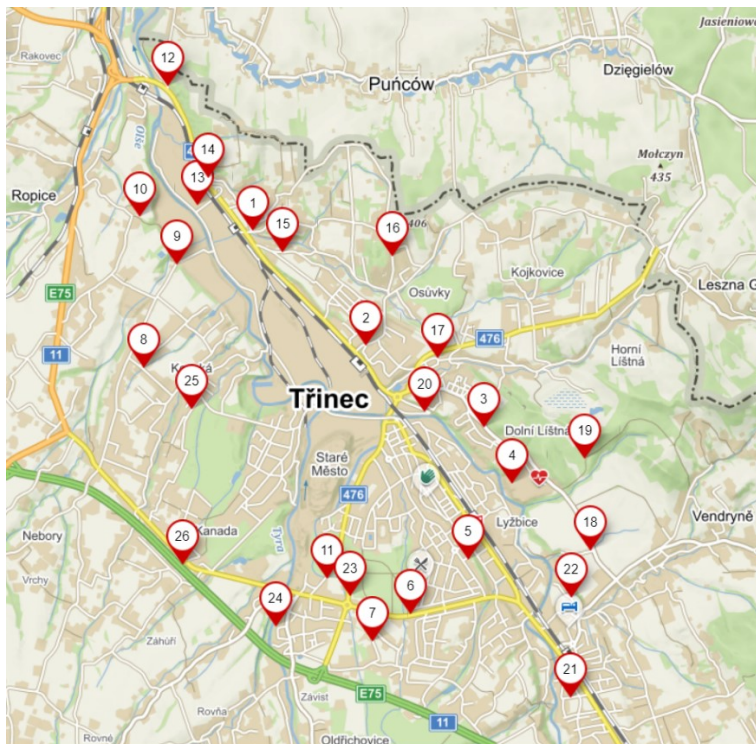
Vzorkování bylo provedeno na základě odhadu největšího zatížení oblasti kolem průmyslových podniků, které bylo následně doplněno širším okruhem okolo těchto podniků. Jedná se o Liberty Ostrava a.s. v areálu Nové hutě v jižní části Ostravy a o Třinecké železářny a.s. v Třinci. Celkem bylo odebráno 52 vzorků, kdy polovina počtu vzorků náležela vždy jednomu z měst. Přesná zeměpisná data společně s označením lokalit byla zaznamenána v tabulce č. 3. Místa odběru jsou rovněž zaznamenána na mapě (s odpovídajícím písemným a číselným označením pro jednotlivý vzorek) na obrázcích č. 3 pro Ostravu a č. 4 pro Třinec.

Vzorek	GPS souřadnice	Vzorek	GPS souřadnice
O1	49°48'30.082"N, 18°20'14.240"E	T1	49°42'5.782"N, 18°38'39.356"E
O2	49°48'12.864"N, 18°21'24.397"E	T2	49°41'21.185"N, 18°39'47.068"E
O3	49°47'56.282"N, 18°20'39.564"E	T3	49°40'50.190"N, 18°40'57.005"E
O4	49°47'12.908"N, 18°20'59.864"E	T4	49°40'28.081"N, 18°41'14.593"E
O5	49°47'48.019"N, 18°19'52.093"E	T5	49°39'58.451"N, 18°40'48.146"E
O6	49°48'51.641"N, 18°19'52.963"E	T6	49°39'37.356"N, 18°40'13.806"E
O7	49°48'52.013"N, 18°20'12.479"E	T7	49°39'26.868"N, 18°39'51.040"E
O8	49°48'21.769"N, 18°18'0.334"E	T8	49°41'12.981"N, 18°37'33.886"E
O9	49°47'43.615"N, 18°17'17.834"E	T9	49°41'52.777"N, 18°37'53.913"E
O10	49°46'34.400"N, 18°18'43.900"E	T10	49°42'11.224"N, 18°37'31.800"E
O11	49°49'7.650"N, 18°20'55.300"E	T11	49°39'51.325"N, 18°39'23.977"E
O12	49°47'58.411"N, 18°21'41.706"E	T12	49°43'1.884"N, 18°37'48.291"E
O13	49°47'48.351"N, 18°21'7.562"E	T13	49°42'15.704"N, 18°38'6.116"E
O14	49°48'31.577"N, 18°21'35.140"E	T14	49°42'26.385"N, 18°38'12.280"E
O15	49°48'44.114"N, 18°20'33.670"E	T15	49°41'57.656"N, 18°38'57.177"E
O16	49°49'23.751"N, 18°21'59.743"E	T16	49°41'56.107"N, 18°40'2.972"E
O17	49°49'22.954"N, 18°20'6.894"E	T17	49°41'16.537"N, 18°40'30.019"E
O18	49°49'52.081"N, 18°19'29.545"E	T18	49°40'2.160"N, 18°42'1.369"E
O19	49°49'59.729"N, 18°19'1.127"E	T19	49°40'37.754"N, 18°41'58.067"E
O20	49°50'24.740"N, 18°18'13.002"E	T20	49°40'55.749"N, 18°40'22.202"E
O21	49°47'34.800"N, 18°18'13.263"E	T21	49°39'5.268"N, 18°41'49.473"E
O22	49°47'39.114"N, 18°17'0.756"E	T22	49°39'43.848"N, 18°41'49.888"E
O23	49°46'49.590"N, 18°17'28.353"E	T23	49°39'44.386"N, 18°39'37.437"E
O24	49°45'52.230"N, 18°17'48.157"E	T24	49°39'32.691"N, 18°38'52.866"E
O25	49°46'11.627"N, 18°18'28.635"E	T25	49°40'56.767"N, 18°38'2.626"E
O26	49°46'6.089"N, 18°19'22.168"E	T26	49°39'56.804"N, 18°37'56.996"E

Tab. č. 3: GPS souřadnice lokalit odběru



Obr. č. 3: Mapa odběrových míst v Ostravě O1 – O26 [52]



Obr. č. 4: Mapa odběrových míst v Třinci T1 – T26 [52]

3.1.1 Způsob odběru

Provedeno ve vzdálenosti asi 2 metrů od krajnice, kde byl vytyčen čtverec o rozměrech 1x1 m. Na rozích a středu tohoto čtverce s odkryvem 10 cm svrchní zeminy a s využitím lopatky z tvrzeného plastu se odebraly vzorky. Byly odstraněny zbytky zeleně a kameny. U každého odběrového místa bylo odebráno asi 500 g půdy, která byla uchována ve dvou hermeticky uzavřených odběrových sáčcích [53].

3.2 Úprava vzorku

Půda byla ze dvou sáčků na označeném filtračním papíře smíchána a ponechána v sušárně při 30 °C po dobu 3 hodin. Poté byla provedena kvartace a sítování prvně přes síto o velikosti ok 2 mm a následně přes síto s velikostí ok 0,5 mm. Upravená frakce byla uchována v označených polyethylenových nádobkách pro další analýzy [53].

3.3 Stanovení sušiny

Do předem zvážených a označených Petriho misek bylo naváženo přibližně 1 g vzorku s přesností na čtyři desetinná místa. Poté byly misky přesunuty do předehřáté sušárny s nastavenou teplotou na 105 °C a byly zde ponechány po dobu 4 hodin. Vzorky byly vysušeny do konstantní hmotnosti a ponechány v exikátoru k vychladnutí. Následně byly zváženy s přesností na 4 desetinná místa a z úbytku hmotnosti byla stanovena sušina [53].

3.4 Stanovení pH

Pro stanovení pH půdy byl použit extrakční roztok 0,01 M chloridu vápenatého. Do polyethylenové nádoby vhodné velikosti bylo naváženo 2 g upraveného půdního vzorku, přidalo se 10 ml extrakčního roztoku a suspenze se v uzavřené nádobce na mechanické třepačce nechala extrahovat 1 hodinu. Poté se nechala další 1 hodinu v klidu stát a před samotným měřením pH se suspenze protřepala. Odečítaný údaj byl považován za stabilní, pokud se hodnota pH nezměnila o 0,02 jednotek pH za 5 vteřin [53].

3.5 Stanovení kationtové výměnné kapacity (KVK)

Hodnotou komplexně charakterizující kationtovou výměnnou kapacitu je procentuální stupeň nasycenosti označován jako V . Základní veličinou k výpočtu V je maximální sorpční kapacita výměnných bazických kationtů T , kterou dostaneme díky stanovení okamžitého obsahu výměnných bazických kationtů S společně s potenciální hydrolytickou půdní reakcí Ha [54].

$$V = \frac{S}{T} \cdot 100 \quad T = Ha + S$$

3.5.1 Stanovení potenciální hydrolytické půdní reakcí (Ha)

Do polyethylenové nádoby vhodné velikosti bylo naváženo 1 g upraveného vzorku. Bylo přilito 2,5 ml 1 M octanu amonného, nádoba byla uzavřena zátkou a byla ponechána na třepače 1 hodinu. Po hodině se suspenze přefiltrovala a z filtrátu bylo odebráno 1,25 ml do titrační baňky. Do roztoku se přidalo 10 ml destilované vody a 3 kapky fenolftaleinu. Tento roztok se titroval 0,1 M roztokem hydroxidu sodného do slabě růžového zbarvení. Ze získané hodnoty spotřeby se provedl výpočet hodnoty Ha [54].

3.5.2 Stanovení okamžitého obsahu výměnných bazických kationtů (S)

Do polyethylenové nádoby vhodné velikosti bylo naváženo 0,5 g upraveného vzorku. Bylo přilito 5 ml 0,1 M kyseliny chlorovodíkové, nádoba byla uzavřena zátkou a byla ponechána na třepače 1 hodinu. Po hodině se suspenze přefiltrovala a z filtrátu bylo odebráno 2,5 ml do titrační baňky. Do roztoku se přidalo 10 ml destilované vody a 3 kapky fenolftaleinu. Tento roztok se titroval 0,1 M roztokem hydroxidu sodného do slabě růžového zbarvení. Ze získané hodnoty spotřeby se provedl výpočet hodnoty S [54].

3.6 Převedení vzorku do roztoku

3.6.1 Sekvenční extrakce BCR

Extrakce vyměnitelné frakce a frakce vodou a kyselinou rozpustné: Do polyethylenové nádoby vhodné velikosti bylo naváženo 0,2 g upraveného vzorku. Bylo přilito 10 ml 0,11 M kyseliny octové. Nádoba byla uzavřena zátkou a byla ponechána na třepače 16 hodin. Následně se extrakt od pevného zbytku oddělil pomocí centrifugačního zařízení. Extrakt byl převeden do označené vialky se špuntíkem a byl uschován v lednici. Tímto postupem se z půdního vzorku získaly rozpustné a vyměnitelné kationty a kationty vázané na karbonáty.

Extrakce frakce redukovatelné: Do polyethylenové nádoby vhodné velikosti bylo naváženo 0,2 g upraveného vzorku. Bylo přilito 10 ml 0,5 M hydroxylamin hydrochloridu, který byl upraven na hodnotu pH 2 kyselinou dusičnou. Nádoba byla uzavřena zátkou a byla ponechána na třepače 16 hodin. Následně se extrakt od pevného zbytku oddělil pomocí centrifugačního zařízení. Extrakt byl převeden do označené vialky se špuntíkem a byl uschován v lednici. Tímto postupem se z půdního vzorku získaly oxidy a hydroxidy železa a manganu.

Extrakce frakce oxidovatelné: Do polyethylenové nádoby vhodné velikosti bylo naváženo 0,2 g upraveného vzorku. Byly přility 2,5 ml 8,8 M peroxidu vodíku a suspenze byla ponechána na třepače 1 hodinu a další hodinu nechala v klidu. Dále se přidalo 10 ml 1 M octanu amonného, který byl upraven na hodnotu pH 2 kyselinou dusičnou. Nádoba byla

uzavřena zátkou a byla ponechána na třepačce 16 hodin. Následně se extrakt od pevného zbytku oddělil pomocí centrifugačního zařízení. Extrakt byl převeden do označené vialky se špuntíkem a byl uschován v lednici. Tímto postupem se z půdního vzorku získal podíl vázaný na organickou hmotu a sulfidy [55].

3.6.2 Totální rozklad

Do teflonové patrony bylo naváženo 0,5 g upraveného vzorku, přilily se 3 ml kyseliny dusičné a 9 ml kyseliny chlorovodíkové. Patrona se uzavřela a přesunula do mikrovlnného zařízení. Pomocí ovládacího panelu se nastavil program procesu rozkladu (15 min – zahřívání na 200 °C; 15 min – udržování teploty při 200 °C; 10 min – chlazení), který se poté spustil. Po vychladnutí se patrona otevřela a po přecentrifugování směsi se extrakt převedl do označené vialky, která se následně uzavřela těsnícím špuntíkem. Nakonec se extrakt uschoval v lednici.



Obr. č. 5: Zařízení pro mikrovlnný rozklad – ETHOS EASY

3.7 Stanovení rtuti

Stanovení rtuti bylo provedeno pomocí přístroje AMA 254 na vzorcích půdy v pevném stavu. Nejdříve se otevřel přívod kyslíku, zapnul se přístroj AMA 254 společně s počítačem a s programem pro AMA 254. Vyčkalo se 20 minut na ustálení teplot v peci v přístroji. Poté se spustil proces čištění se 100 µl vody z kohoutku – parametry: 60/120/45 (pokud byla naměřená absorbance vyšší jak 0,003, čištění se opakovalo) a analýza slepého vzorku (blank)

s prázdnou lodičkou – parametry: 60/60/45. Pro ověření platnosti kalibrace se použil roztok o přesně známé koncentraci, kde by výsledná hodnota měla odpovídat množství rtuti, jež vzorek obsahoval a to s odchylkou maximálně 10 %. Následovala samotná analýza neznámého vzorku nadávkováním přibližně 50 mg vzorku na lodičku s parametry měření: 60/150/45. Po skončení všech analýz se spustil opět proces čištění, následovalo chlazení přístroje a vypnutí přístrojů s uzavřením přívodu kyslíku.

Proces	Sušení [s]	Rozklad [s]	Čekání [s]
Čištění	60	120	45
Blank	60	60	45
Vzorek	60	150	45

Tab. č. 4: Parametry teplotních procesů měření



Obr. č. 6: Atomový absorpční spektrometr – AMA 254 [56]

3.8 Stanovení vybraných kovů

Stanovení chromu, manganu, mědi, niklu, olova a zinku bylo provedeno u extraktů půdy (kap. 3.6) pomocí F-AAS na přístroji ContrAA 300 (Analytik Jena AG), který byl vybaven hořákem o šířce 50 mm a xenonovou výbojkou jako zdroj záření. Před samotným měřením se nejprve zapnul počítač s přístrojem a v ovládacím programu AspectCS se vytvořila metoda pro stanovení daných prvků s jednotlivými parametry nastavení (viz tabulka č. 5). Před vlastním měřením byly pro každý stanovovaný prvek připraveny řady kalibračních roztoků a dále byly vzorky naředěny dle potřeby tak, aby se očekávaná koncentrace měřeného kovu pohybovala v rozsahu kalibrace. Dále byl otevřen přívod acetylénu a vzduchu a následovalo zažehnutí plamene. Analýza proběhla měřením blanku, kalibrační řady a sestrojila se kalibrační křivka. Poté proběhla analýza samotných vzorků, kdy se měření jednoho vzorku opakovalo 3krát. V některých případech, kdy se koncentrace kovu nevyskytovala v rozsahu kalibrace, se vzorky dále patřičně naředily a měření se opakovalo.

Prvek	Vlnová délka [nm]	Výška hořáku [mm]	Průtok C ₂ H ₂ -vzduch [l.h ⁻¹]	Kalibrační rozsah [mg.l ⁻¹]
Cr	357,87	8	85	0 - 1,00
Mn	279,48	6	80	0 - 0,75
Cu	324,75	6	50	0 - 1,50
Ni	232,00	5	45	0 - 1,50
Pb	217,00	6	65	0 - 1,50
Zn	213,86	6	55	0 - 0,60

Tab. č. 5: Parametry nastavení pro stanovení jednotlivých kovů



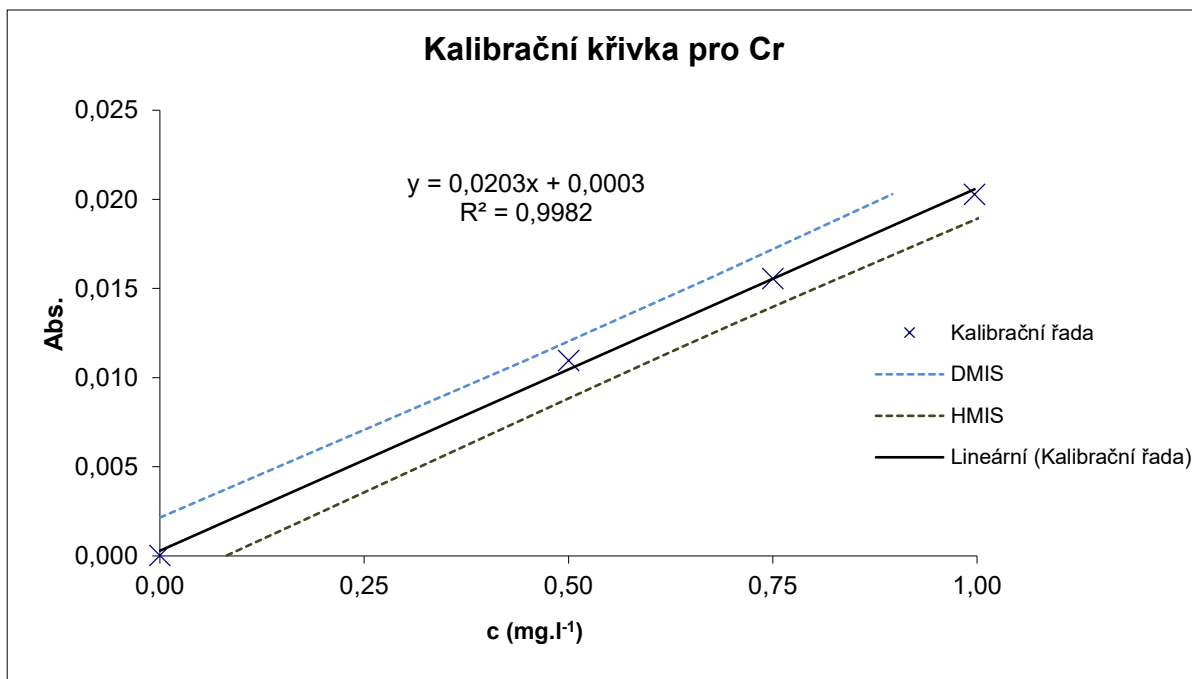
Obr. č. 7: Atomový absorpční spektrometr s atomizací v plameni – ContrAA 300

3.8.1 Kalibrační křivky

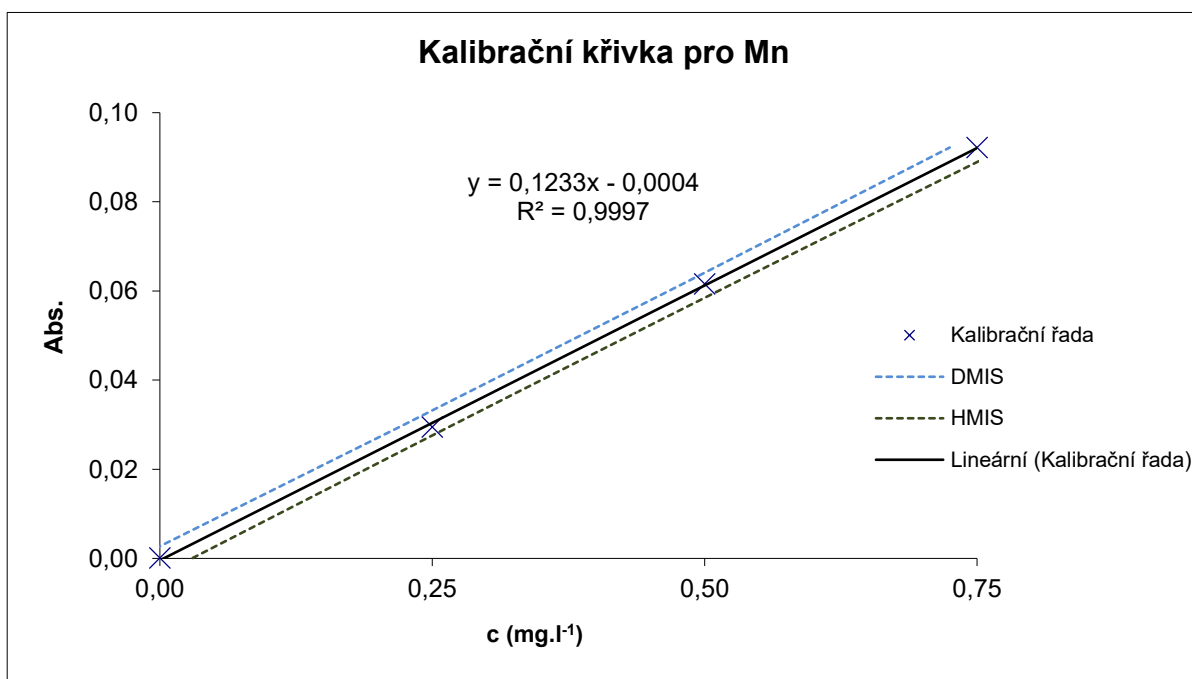
V tabulce č. 6 jsou uvedeny hodnoty meze detekce (LOD) pro jednotlivé kovy. V následujících grafech (grafy č. 5–10) jsou také zobrazeny jejich kalibrační závislosti.

Prvek	LOD [mg.l ⁻¹]
Cr	0,0665
Mn	0,0191
Cu	0,0155
Ni	0,0178
Pb	0,0479
Zn	0,0232

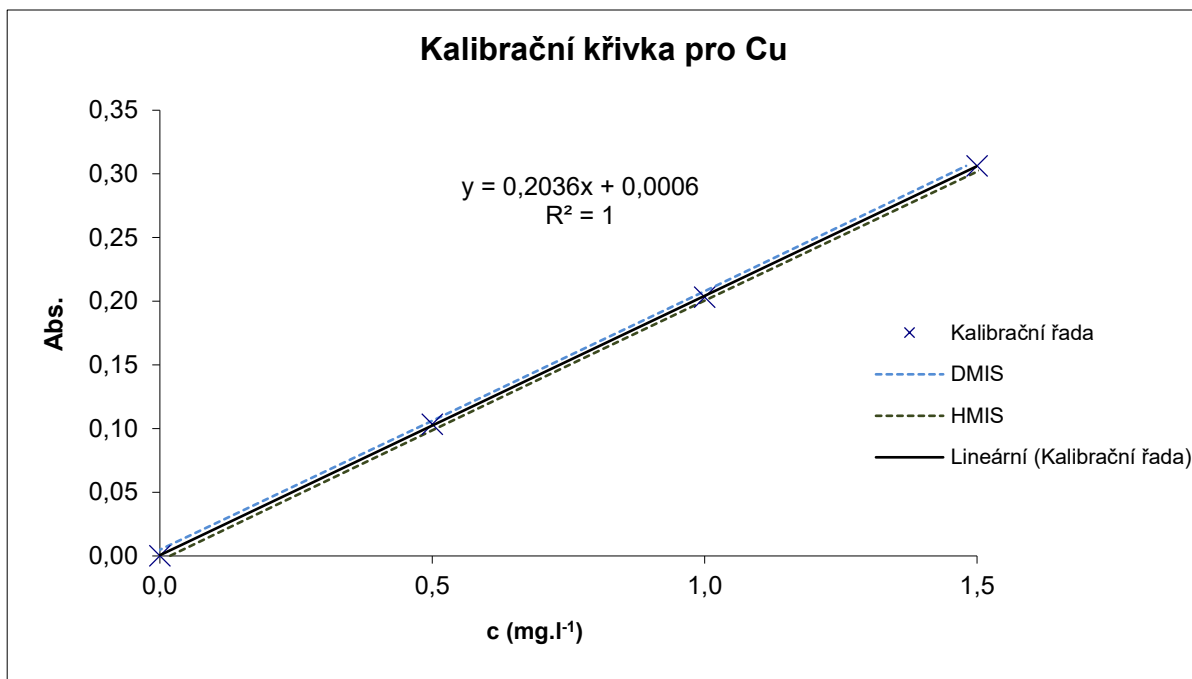
Tab. č. 6: Meze detekce pro jednotlivé kovy



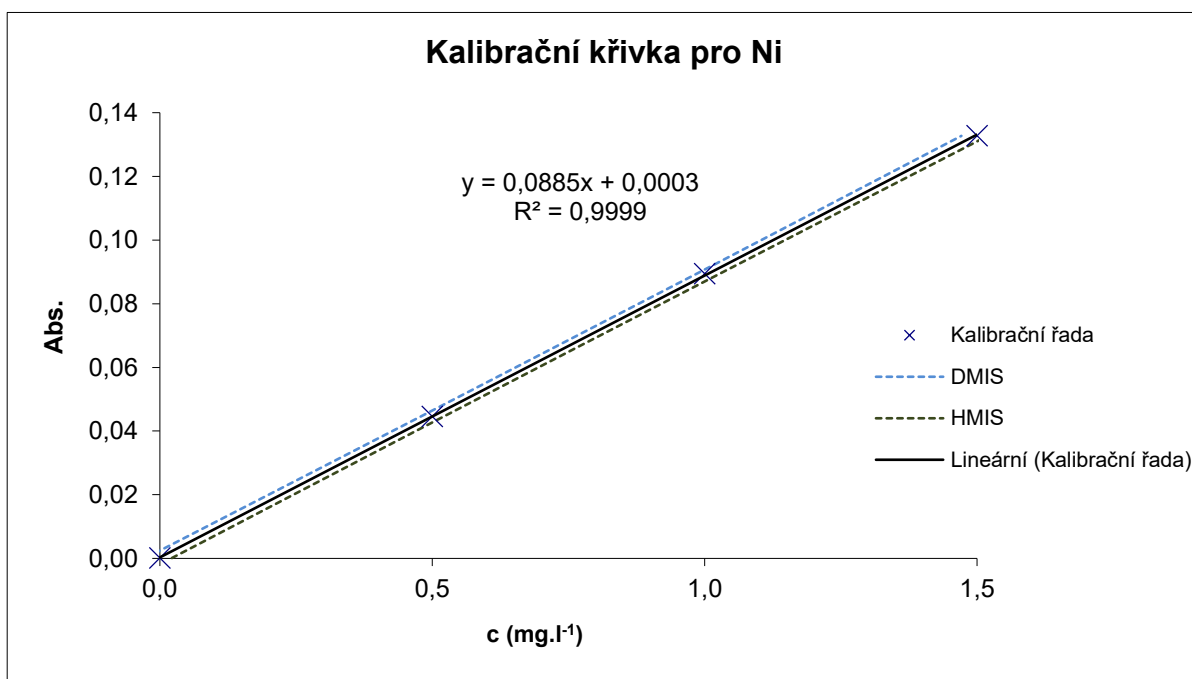
Graf č. 5: Kalibrační závislost pro stanovení chromu



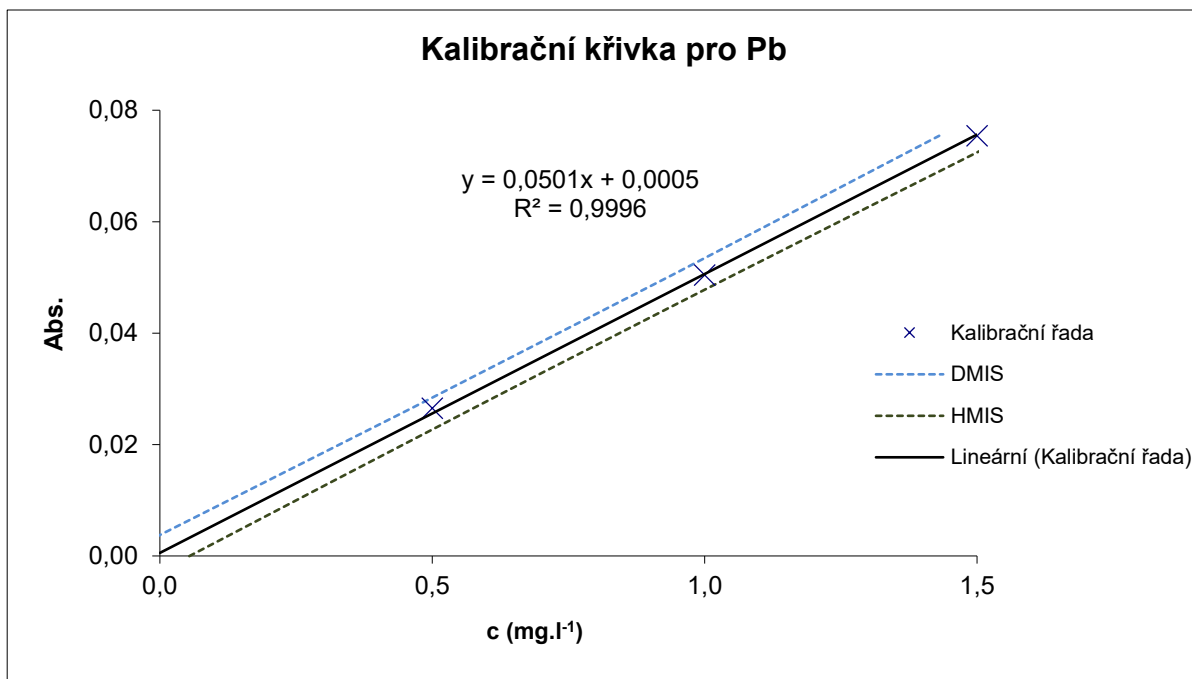
Graf č. 6: Kalibrační závislost pro stanovení manganu



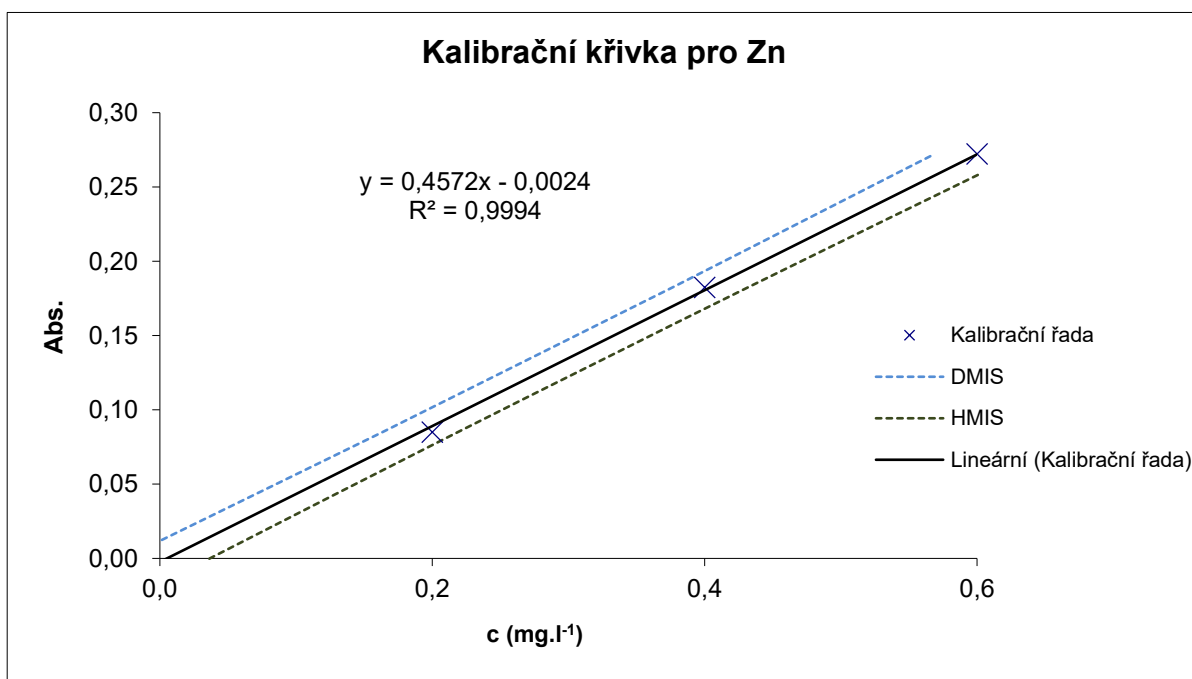
Graf č. 7: Kalibrační závislost pro stanovení mědi



Graf č. 8: Kalibrační závislost pro stanovení niklu



Graf č. 9: Kalibrační závislost pro stanovení olova



Graf č. 10: Kalibrační závislost pro stanovení zinku

3.9 Měření IČ

IČ spektra byla změřena pomocí přístroje Alpha II (Bruker, Německo), který byl vybaven modulem DRIFT. Měření bylo provedeno s upravenými vzorky půdy na frakci 0,5 mm. Po zapnutí počítače a spektrometru se v programu OPUS 8.1 nastavily parametry měření. Pro každý vzorek bylo pořízeno 25 skenů. Spektrum bylo naměřeno v rozmezí od 7500 do 400 cm^{-1} s rozlišením spektra 8 cm^{-1} . Pro minimalizaci šumu pozadí a ke korekci přístroje se před začátkem měření a následně po každých pěti měřeních naskenovala reference ze zlata. Vzorek půdy byl nadávkován do hliníkového pohárku až po okraj a byl opatrně udusán tak, aby se na povrchu vytvořila jednolitá vrstva. Po doměření byly spektra v počítači uloženy a následně použity pro další zpracování spekter a dat.



Obr. č. 8: FTIR spektrometr s modulem DRIFT – Alpha II [57]

3.10 Použité chemikálie

- Dihydrát chloridu vápenatého $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (min. 99 %): Penta
- Peroxid vodíku H_2O_2 (29–32 %): Penta
- Octan amonný $\text{CH}_3\text{COONH}_4$ (min. 98 %): Lach-Ner
- Kyselina octová ledová CH_3COOH (min. 99,8 %): Penta
- Kyselina dusičná HNO_3 (65 %): Penta
- Hydroxylamin hydrochlorid $\text{NH}_2\text{OH} \cdot \text{HCl}$ (min. 99 %): Penta
- Hydroxid sodný NaOH (min. 98 %): Lach-Ner
- Kyselina chlorovodíková HCl (35 %): Penta
- Kalibrační standard roztoku chromu ($c = 1 \pm 0,002 \text{ g.l}^{-1}$): Analytika Praha
- Kalibrační standard roztoku manganu ($c = 1 \pm 0,002 \text{ g.l}^{-1}$): Analytika Praha
- Kalibrační standard roztoku mědi ($c = 1 \pm 0,002 \text{ g.l}^{-1}$): Analytika Praha
- Kalibrační standard roztoku niklu ($c = 1 \pm 0,002 \text{ g.l}^{-1}$): Analytika Praha
- Kalibrační standard roztoku olova ($c = 1 \pm 0,002 \text{ g.l}^{-1}$): Analytika Praha
- Kalibrační standard roztoku rtuti ($c = 1 \pm 0,002 \text{ g.l}^{-1}$): Analytika Praha
- Kalibrační standard roztoku zinku ($c = 1 \pm 0,002 \text{ g.l}^{-1}$): Analytika Praha
- MiliQ voda, destilovaná voda

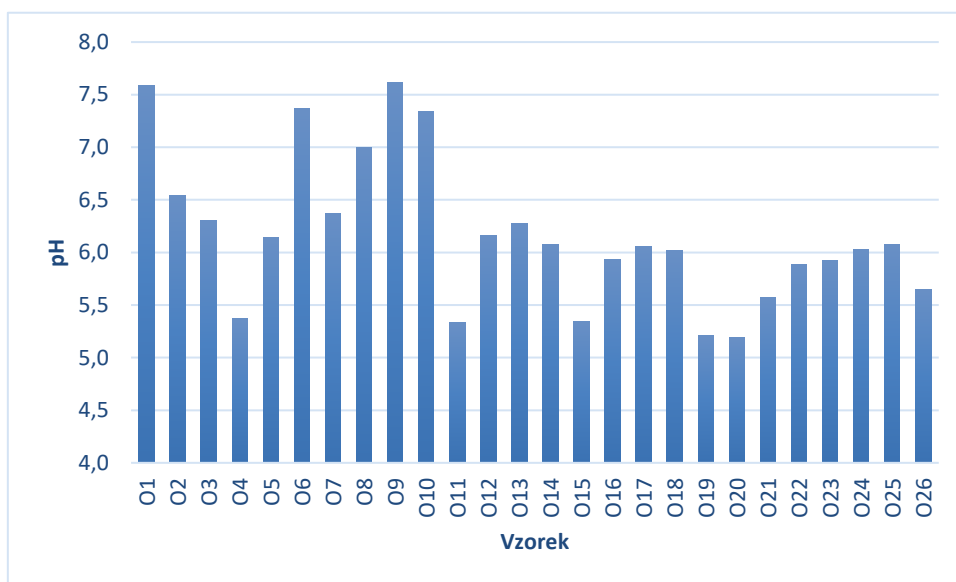
3.11 Použité zařízení a pomůcky

- AMA 254 (Altec, ČR)
- ContraAA 300 (Analytik Jena AG, Německo)
- Alpha II – DRIFT modul (Bruker, Německo)
- ETHOS EASY (Milestone, Itálie)
- Sušárna (model 500, Memmert, Německo)
- Síta o velikost ok 2 mm a 0,5 mm
- Analytické váhy (Denver Instrument, Německo)
- Exikátor
- Mechanické třepací zařízení (LT2)
- Centrifugační zařízení
- Mikropipety
- pH-metr (WTW 320)
- Zařízení pro přípravu ultra čisté vody (PURELAB Classic, Elga Pl 5242)
- Tlaková láhev s kyslíkem (čistota 2,5; SIAD)
- Tlaková láhev s acetylenem (čistota 2,6; Messer Technogas)

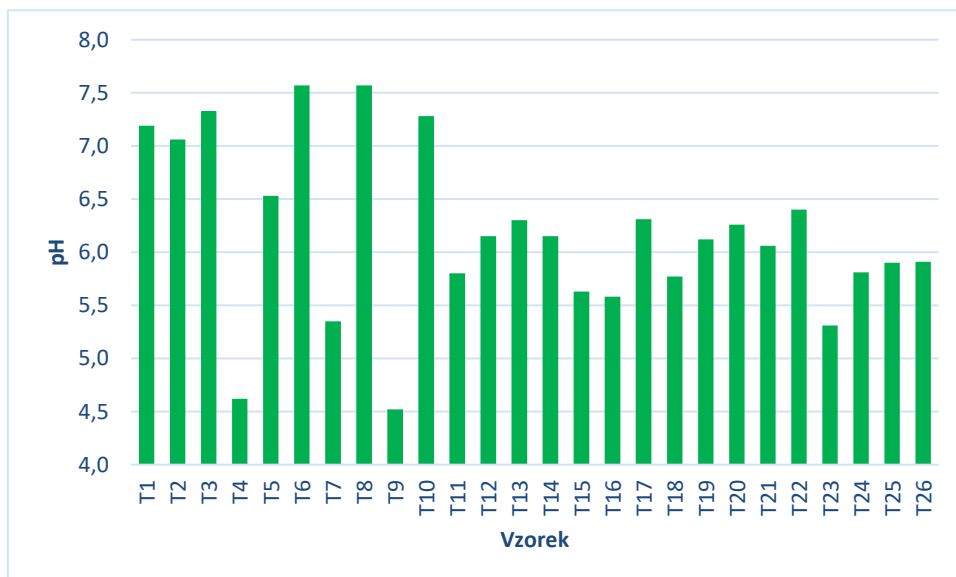
4 VÝSLEDKY A DISKUZE

4.1 Vyhodnocení stanovení pH

Při stanovení pH byl použit 0,01 M extrakční roztok chloridu vápenatého a postupovalo se dle postupu uvedeného v kapitole 3.4. Všechny naměřené hodnoty pH jsou uvedeny v příloze č. 1. Hodnoty pH obou lokalit jsou také graficky znázorněny v grafech č. 11 a 12.



Graf č. 11: Hodnoty pH pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy



Graf č. 12: Hodnoty pH pro jednotlivá odběrová místa z Třince

Z grafů lze vyčíst, že se hodnoty pH u obou měst pohybují v mírně kyselé oblasti v rozmezí hodnot pH od 7,50 do 5,30. Výjimku tvoří dva vzorky z Třince (T4 a T9), u kterých byly naměřeny hodnoty pH 4,62 a 4,52. Nižší hodnoty pH můžou být zapříčiněny vstřebáváním kyselých srážek či sněhu do půdy anebo zvýšeným obsahem organických látek v půdě.

4.2 Vyhodnocení stanovení kationtové výměnné kapacity (KVK)

Díky stanovení hodnot okamžitého obsahu výměnných bazických kationtů S společně s potenciální hydrolytickou půdní reakcí Ha se u jednotlivých vzorků půd vypočítaly hodnoty pro maximální sorpční kapacitu výměnných bazických kationtů T a pro procentuální stupeň nasycenosti V . Všechny vypočítané hodnoty jsou uvedeny v tab. č. 7 pro vzorky z lokality Ostrava a v tab. č. 8 pro lokalitu Třinec.

Vzorek	Ha [mmol.kg ⁻¹]	S [mmol.kg ⁻¹]	T [mmol.kg ⁻¹]	V [%]
O1	191,87	141,55	333,41	42,45
O2	157,67	137,97	295,65	46,67
O3	140,07	127,39	267,46	47,63
O4	175,32	129,69	305,00	42,52
O5	122,22	136,05	258,27	52,68
O6	105,29	153,97	259,26	59,39
O7	139,21	133,97	273,18	49,04
O8	104,93	169,56	274,49	61,77
O9	69,84	173,86	243,70	71,34
O10	87,52	137,01	224,53	61,02
O11	139,90	122,37	262,27	46,66
O12	122,46	137,12	259,59	52,82
O13	122,60	166,43	289,03	57,58
O14	157,74	138,83	296,57	46,81
O15	104,83	132,72	237,55	55,87
O16	122,75	147,06	269,80	54,51
O17	139,69	142,34	282,03	50,47
O18	104,67	141,49	246,16	57,48
O19	139,55	125,92	265,48	47,43
O20	139,28	131,87	271,14	48,63
O21	104,44	141,04	245,48	57,46
O22	104,54	152,40	256,94	59,31
O23	122,57	126,66	249,23	50,82
O24	122,77	139,86	262,63	53,25
O25	104,92	139,94	244,86	57,15
O26	122,04	127,85	249,88	51,16

Tab. č. 7: Výsledné hodnoty pro stanovení KVK u vzorků z Ostravy

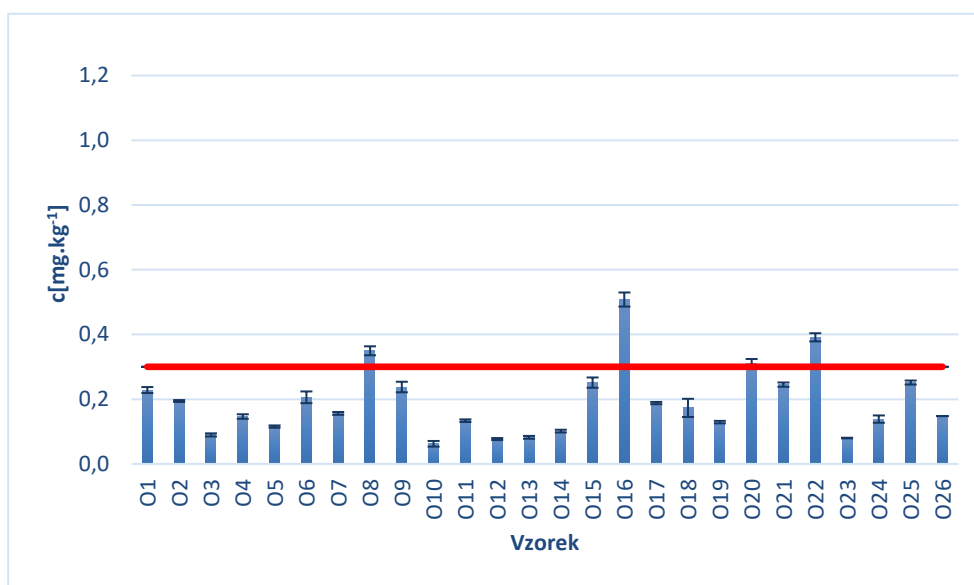
Vzorek	Ha [mmol.kg ⁻¹]	S [mmol.kg ⁻¹]	T [mmol.kg ⁻¹]	V [%]
T1	105,04	151,21	256,26	59,01
T2	174,72	178,07	352,79	50,47
T3	104,99	192,77	297,76	64,74
T4	175,05	127,24	302,29	42,09
T5	139,90	138,28	278,18	49,71
T6	105,02	162,02	267,04	60,67
T7	139,78	126,10	265,88	47,43
T8	104,98	194,97	299,95	65,00
T9	157,74	125,95	283,69	44,40
T10	122,52	161,55	284,07	56,87
T11	139,99	120,84	260,83	46,33
T12	104,60	168,00	272,60	61,63
T13	122,48	180,04	302,51	59,51
T14	87,73	196,35	284,08	69,12
T15	157,59	129,35	286,95	45,08
T16	139,82	139,44	279,26	49,93
T17	121,95	194,02	315,97	61,40
T18	105,28	140,79	246,07	57,21
T19	105,18	193,81	298,98	64,82
T20	87,66	182,11	269,76	67,51
T21	104,70	134,43	239,13	56,22
T22	87,50	142,00	229,50	61,87
T23	121,99	130,13	252,12	51,61
T24	87,74	186,19	273,92	67,97
T25	87,58	138,75	226,33	61,30
T26	122,49	152,15	274,64	55,40

Tab. č. 8: Výsledné hodnoty pro stanovení KVK u vzorků z Třince

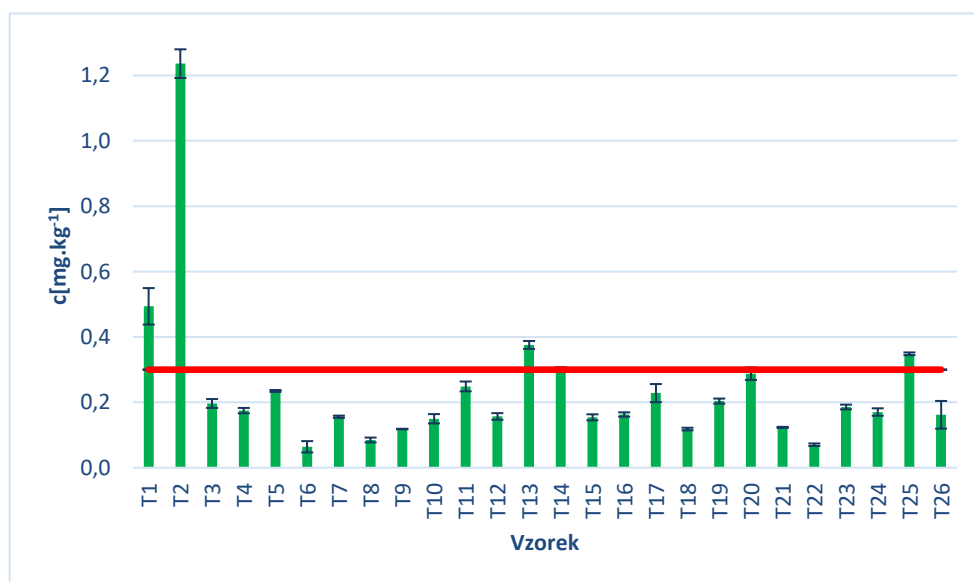
Z hodnot uvedených v tab. č. 7 a 8 je patrné, že z pohledu hodnot KVK se jedná o velice podobné půdy. U vzorků z lokality Ostrava lze pozorovat o něco vyšší hodnoty než u vzorků z lokality Třince. Hodnoty pro maximální sorpční kapacitu výměnných bazických kationtů T označené oranžovým písmem odpovídají půdám se střední maximální sorpční kapacitou (T v rozmezí hodnot 125–250 mmol.kg⁻¹). Hodnoty označené černým písmem odpovídají kategorii s vysokou maximální sorpční kapacitou (T v rozmezí hodnot 250–350 mmol.kg⁻¹). U hodnot pro procentuální stupeň nasycenosti V platí, že červeně zvýrazněné hodnoty náleží kategorii mírně nasycených půd (V v rozmezí 30–50 %) a nezvýrazněné hodnoty odpovídají kategorii nasycených půd (V v rozmezí 50–75 %). Rovněž můžeme u všech vzorků se zvýrazněnou hodnotou (nižší kategorie) konstatovat, že výsledky se blíží ke spodní hranici vyšší kategorie rozdělení.

4.3 Vyhodnocení stanovení rtuti

Pro stanovení koncentrací rtuti byl použit přístroj AMA 254. Analýza proběhla dle postupu uvedeného v kapitole 3.7 se vzorky v pevném stavu. V tabulce přílohy č. 2 jsou uvedeny hodnoty aritmetického průměru, mediánu, směrodatné odchyly (Smdoch) a relativní směrodatné odchyly (RSD). Hodnoty koncentrací rtuti obou lokalit jsou rovněž graficky znázorněny v grafech č. 13 a 14.



Graf č. 13: Hodnoty koncentrací rtuti pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy



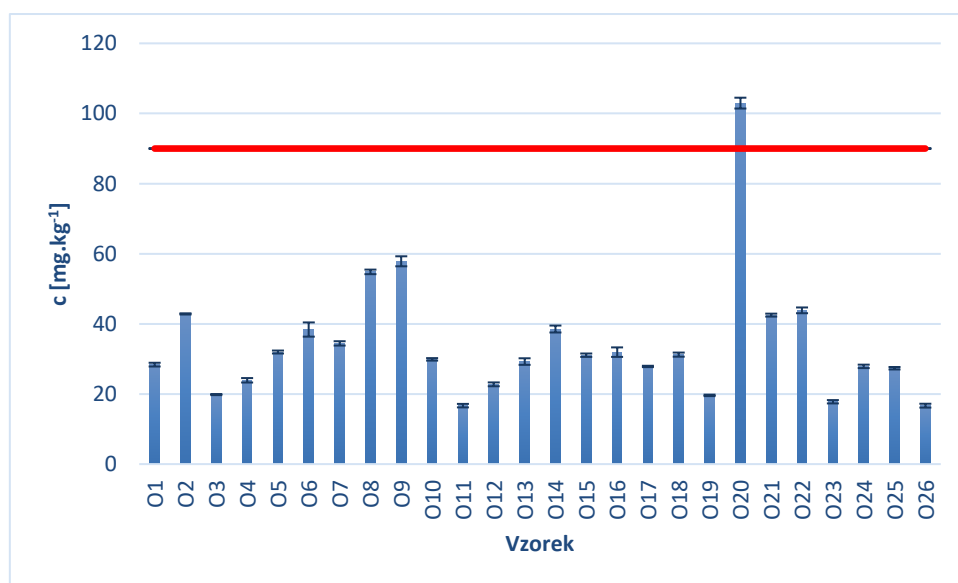
Graf č. 14: Hodnoty koncentrací rtuti pro jednotlivá odběrová místa z Trince

Na uvedených grafech č. 13 a 14 lze pozorovat překročení mezní hodnoty koncentrace rtuti ve čtyřech případech a to jak v lokalitě Ostravy, tak i Třince. Mezní hodnota koncentrace rtuti v půdě je v grafech znázorněna červenou linií a je dána vyhláškou 437/2016 Sb. (0,30 mg.kg⁻¹ sušiny). U vzorku T2 byl limit překročen až 4násobně s koncentrací 1,24 mg.kg⁻¹. U zbylých vzorků se hodnoty koncentrací rtuti v obou lokalitách nijak zvlášť neodlišují a pohybují se většinou v rozmezí od 0,15 do 0,25 mg.kg⁻¹.

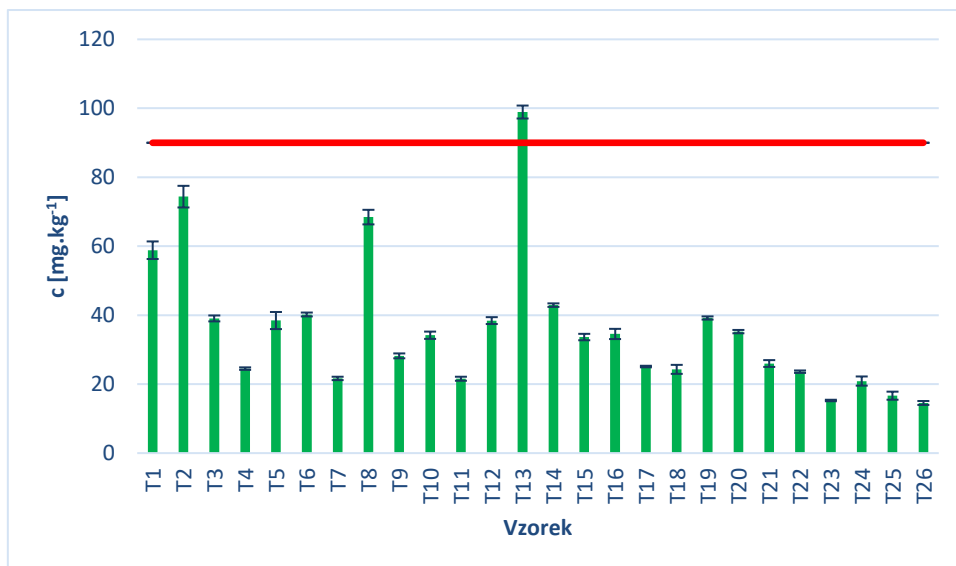
4.4 Vyhodnocení vybraných kovů

Analýza vybraných kovů proběhla pomocí metody F-AAS na přístroji ContraAA 300 dle postupu uvedeného v kapitole 3.8. Vzhledem k neúplnosti dat z důvodu nízkých koncentrací u extraktů BCR se pro následující vyhodnocení použila pouze data z extrakce totálního rozkladu, která proběhla dle postupu v kapitole 3.6.2. Naměřená data jsou uvedena v tabulkách příloh č. 3–8, jako hodnoty aritmetického průměru, mediánu, směrodatné odchylky (Smdoch) a relativní směrodatné odchylky (RSD).

4.4.1 Vyhodnocení stanovení chromu



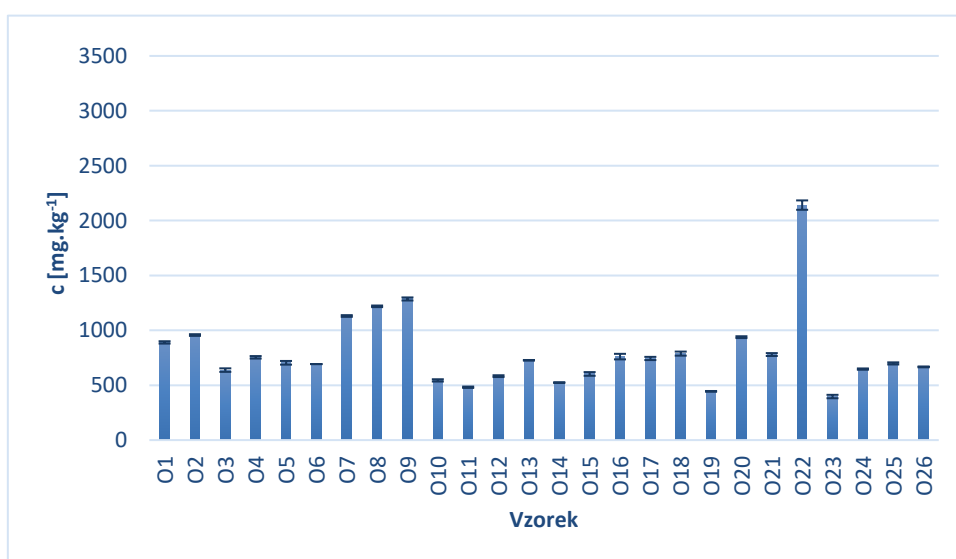
Graf č. 15: Hodnoty koncentrací chromu pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy



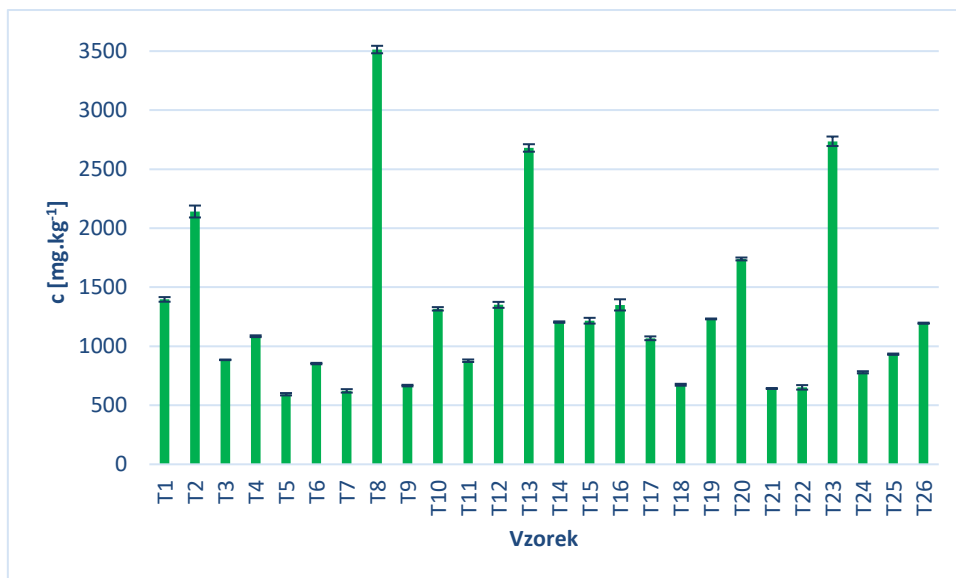
Graf č. 16: Hodnoty koncentrací chromu pro jednotlivá odběrová místa z Třince

Z grafů č. 15 a 16 lze vyčíst, že mezní hodnota koncentrace chromu byla překročena 2krát, jednou u vzorku O20 (103,0 mg.kg⁻¹) a podruhé u vzorku T13 (98,9 mg.kg⁻¹). Mezní hodnota koncentrace chromu v půdě je v grafech znázorněna červenou linií a je dána vyhláškou 437/2016 Sb. (90 mg.kg⁻¹ sušiny). U většiny vzorků z lokalit Ostravy i Třince se koncentrace pohybovaly v rozmezí zhruba od 20,0 do 40,0 mg.kg⁻¹. Byly zjištěny i vyšší hodnoty koncentrací u vzorků O8, O9, T1, T2 a T8, které ale mezní hodnotu nepřekročily. Nejmenší obsah chromu z obou lokalit byl stanoven pro vzorek T26, který činil 14,5 mg.kg⁻¹.

4.4.2 Vyhodnocení stanovení manganu



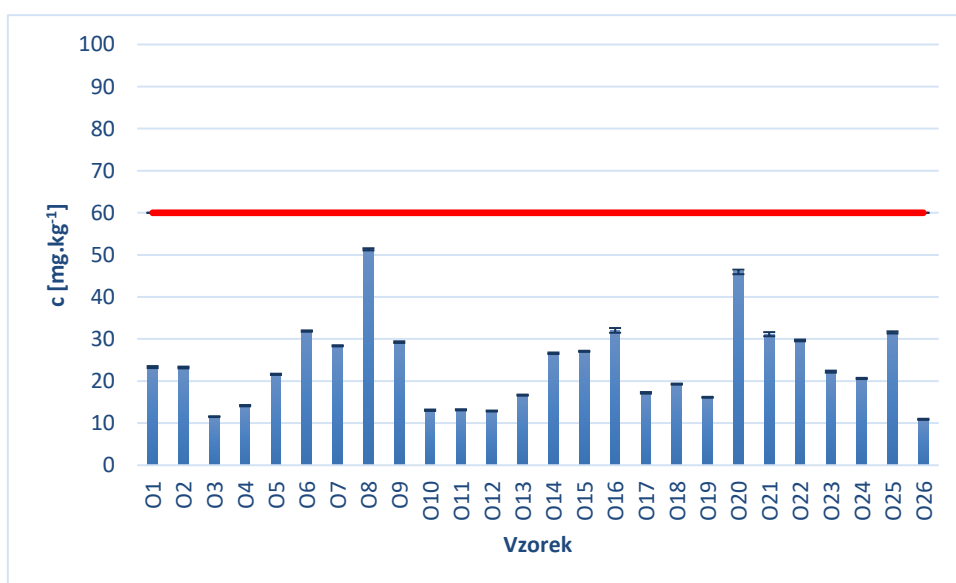
Graf č. 17: Hodnoty koncentrací manganu pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy



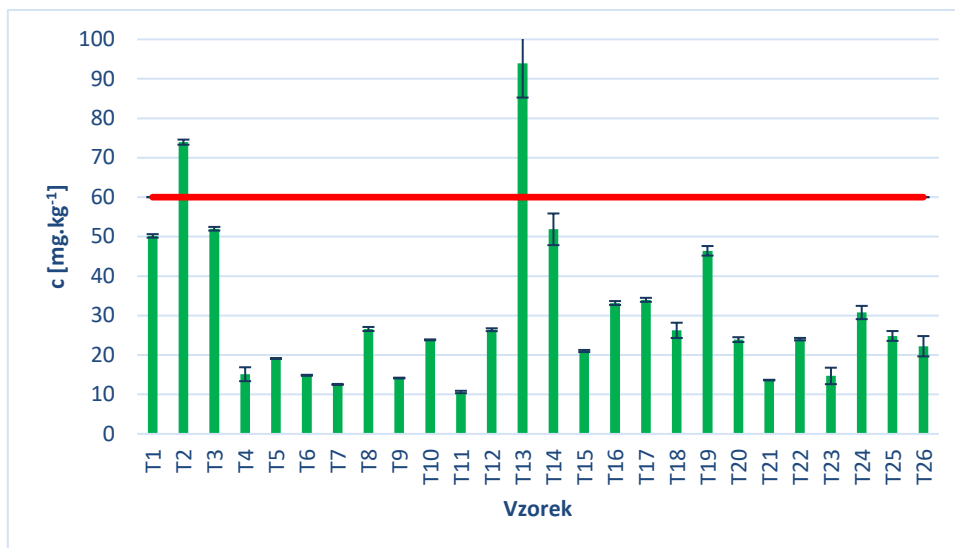
Graf č. 18: Hodnoty koncentrací manganu pro jednotlivá odběrová místa z Třince

Při porovnání obou grafů č. 17 a 18 můžeme konstatovat, že mangan se v půdách z lokality Třince pohybuje na vyšších úrovních než v půdách lokality Ostravy. Hodnoty koncentrací vzorků lokalit Ostravy nepřekračují (s jednou výjimkou u vzorku O22) hodnotu 1300,0 mg.kg⁻¹. Kdežto pro lokalitu Třince skoro polovina vzorků této hodnoty přesahovala. Nejvyšší naměřená koncentrace činila 3513,7 mg.kg⁻¹ pro vzorek T8. Nejmenší pak u vzorku O23, která činila 397,0 mg.kg⁻¹.

4.4.3 Vyhodnocení stanovení mědi



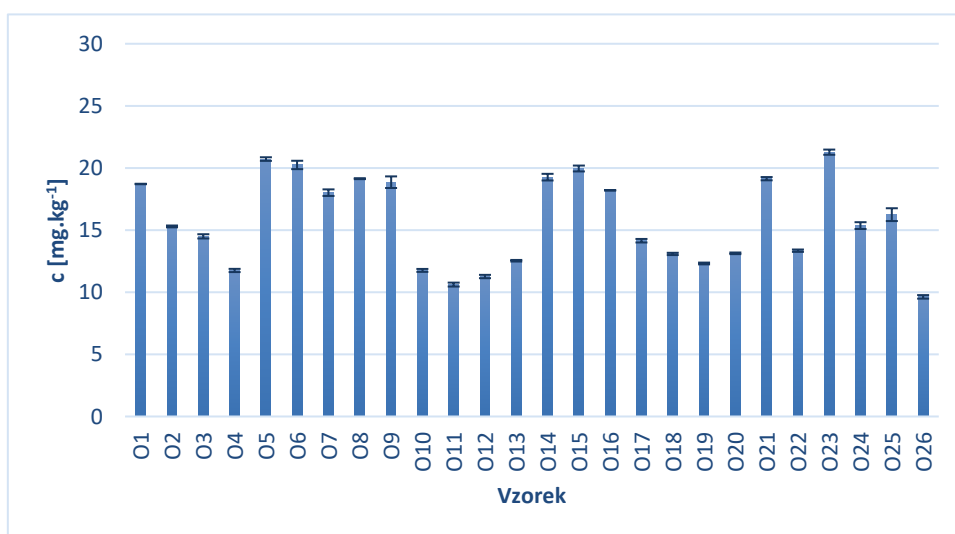
Graf č. 19: Hodnoty koncentrací mědi pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy



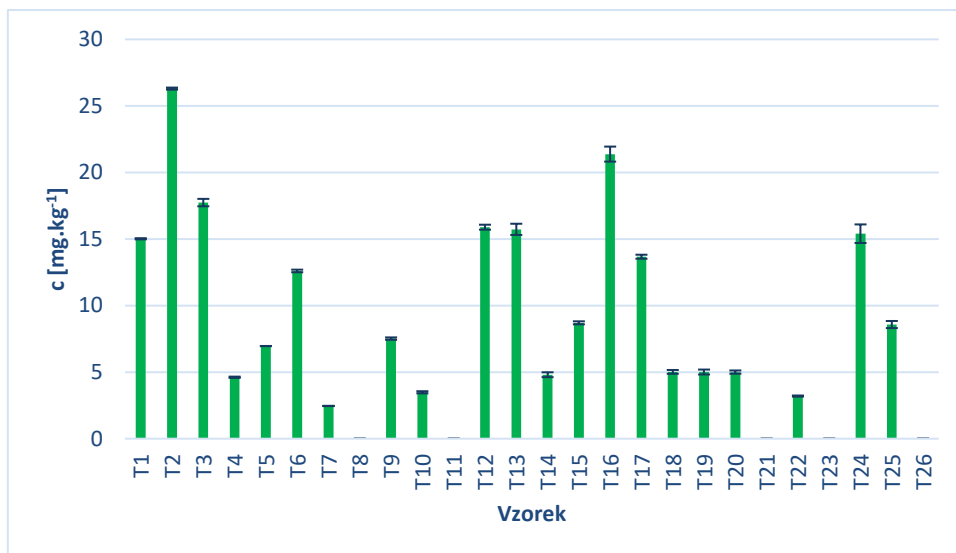
Graf č. 20: Hodnoty koncentrací mědi pro jednotlivá odběrová místa z Třince

Mezní hodnota koncentrace mědi v půdě je v grafech znázorněna červenou linií a je dána vyhláškou 437/2016 Sb. (60 mg.kg^{-1} sušiny). Na grafu č. 20 můžeme pozorovat překročení mezní hodnoty koncentrace mědi u vzorku T2 ($73,9 \text{ mg.kg}^{-1}$) a skoro dvojnásobně u vzorku T13 ($93,9 \text{ mg.kg}^{-1}$). Na grafu č. 19 s hodnotami koncentrací z lokality Ostrava nedošlo k překročení mezní hodnoty. Můžeme ale pozorovat blížící se hodnoty koncentrací k mezní hodnotě u vzorků O8, O20 a pro lokalitu Třince u vzorků T1, T3, T14 a T19. Zbývající hodnoty koncentrací v obou lokalitách se pohybovaly v rozmezí od $10,0$ do $30,0 \text{ mg.kg}^{-1}$.

4.4.4 Vyhodnocení stanovení niklu



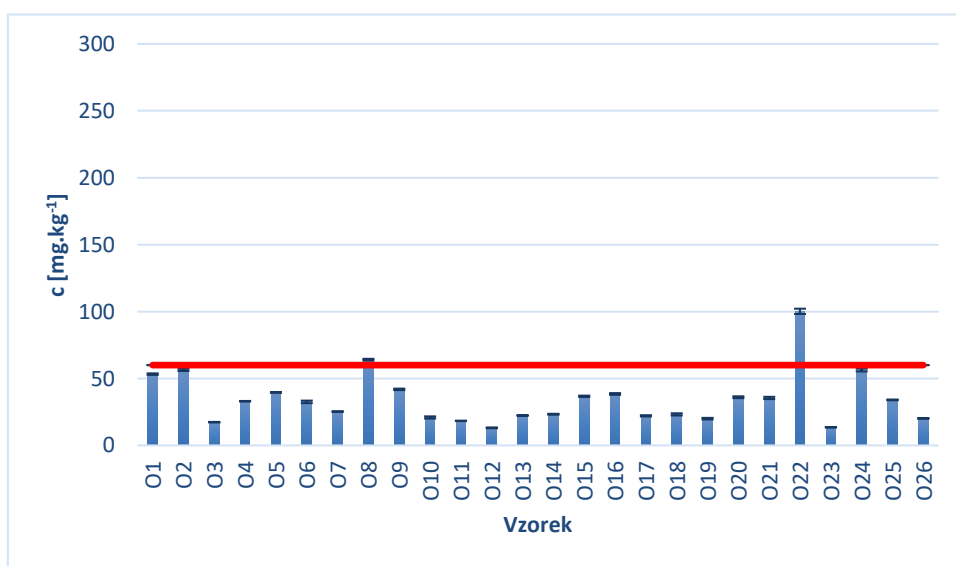
Graf č. 21: Hodnoty koncentrací niklu pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy



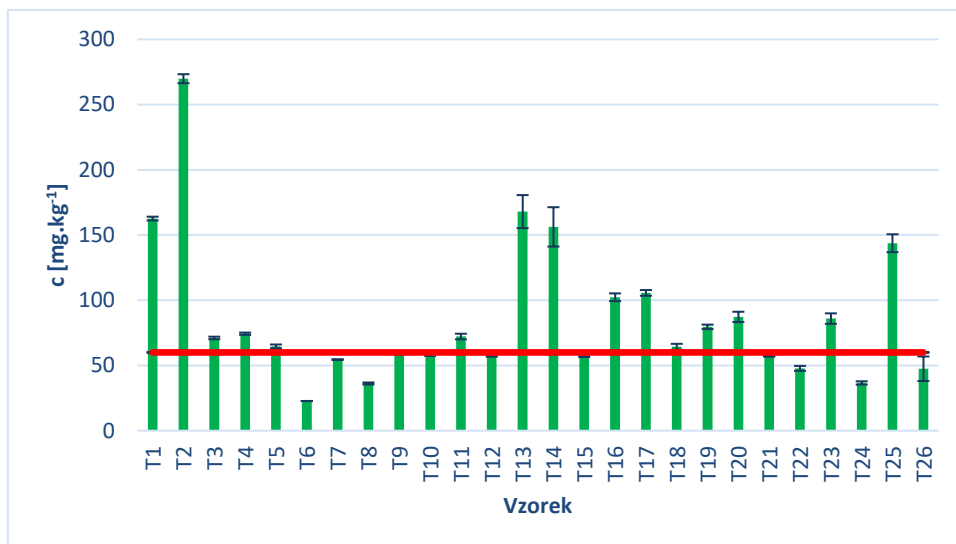
Graf č. 22: Hodnoty koncentrací niklu pro jednotlivá odběrová místa z Třince

Hodnoty koncentrací nepřesáhly mezní hodnotu niklu, která je dána vyhláškou 437/2016 Sb. na 50 mg.kg^{-1} sušiny ani v jedné lokalitě. U grafů č. 21 a 22 můžeme pozorovat, že koncentrace dosahovaly maximálně $26,3 \text{ mg.kg}^{-1}$ (vzorek T2). V případě lokality Ostrava sledujeme poměrně podobné hodnoty koncentrací v rozmezí od $10,0$ do $20,0 \text{ mg.kg}^{-1}$. Naproti tomu v lokalitě Třince se od sebe hodnoty koncentrací jednotlivých vzorků podstatně lišily a některé spadaly i pod meze detekce přístroje, na kterém analýza proběhla.

4.4.5 Vyhodnocení stanovení olova



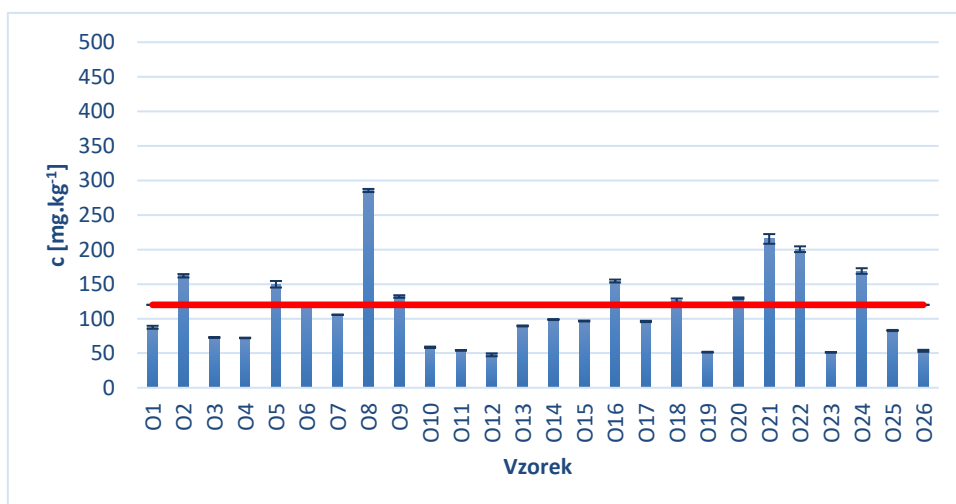
Graf č. 23: Hodnoty koncentrací olova pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy



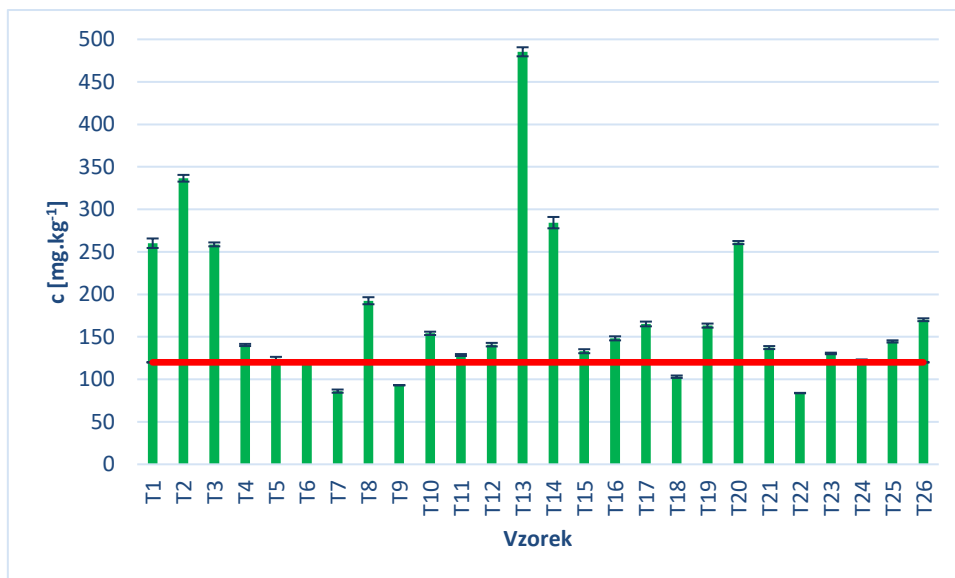
Graf č. 24: Hodnoty koncentrací olova pro jednotlivá odběrová místa z Třince

V grafech č. 23 a 24 můžeme opět pozorovat dramatický rozdíl mezi sledovanými lokalitami v počtu přesáhnutí mezní hodnoty olova v půdě, která je v grafech znázorněna červenou linií a je dána vyhláškou 437/2016 Sb. (60 mg.kg⁻¹ sušiny). Ve 2 případech došlo překročení mezní hodnoty u vzorků z lokality Ostrava a u vzorků z lokality Třince dokonce v 15 případech, kdy nejvyšší obsah olova náležel vzorku T2 s hodnotou koncentrace 269,8 mg.kg⁻¹, což odpovídalo 4,5násobnému překročení mezní hodnoty. U vzorků T1, T13, T14 a T25 se mezní hodnota překročila více než 2násobně. Nejmenší obsah olova byl naměřen u vzorku O12, který činil 13,1 mg.kg⁻¹.

4.4.6 Vyhodnocení stanovení zinku



Graf č. 25: Hodnoty koncentrací zinku pro jednotlivá odběrová místa z Ostravy

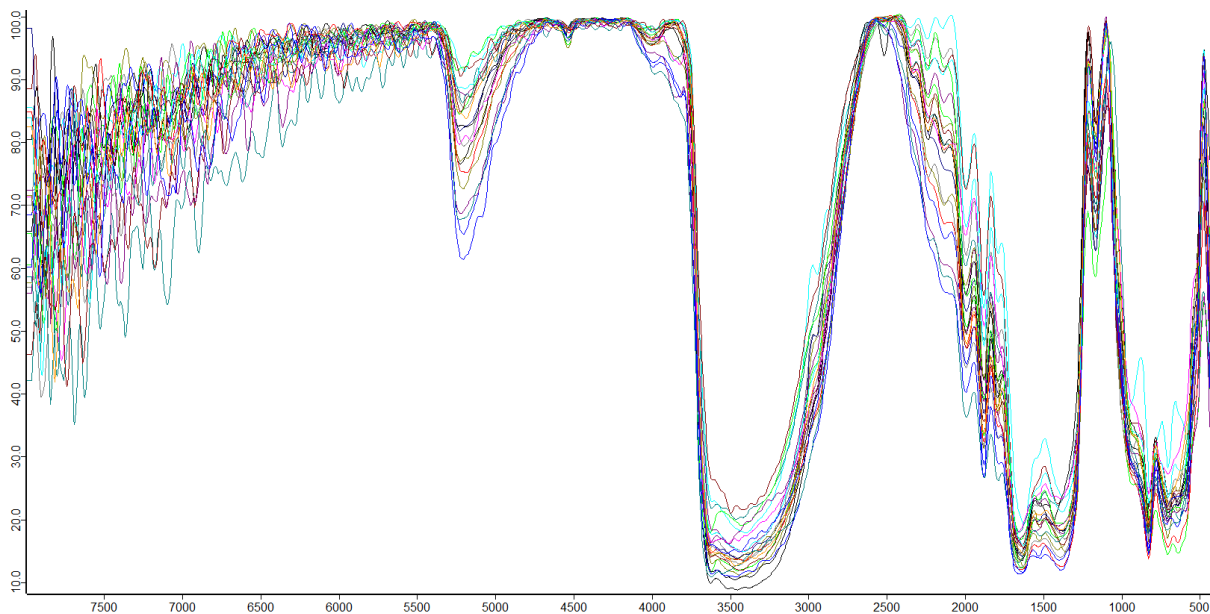


Graf č. 26: Hodnoty koncentrací zinku pro jednotlivá odběrová místa z Třince

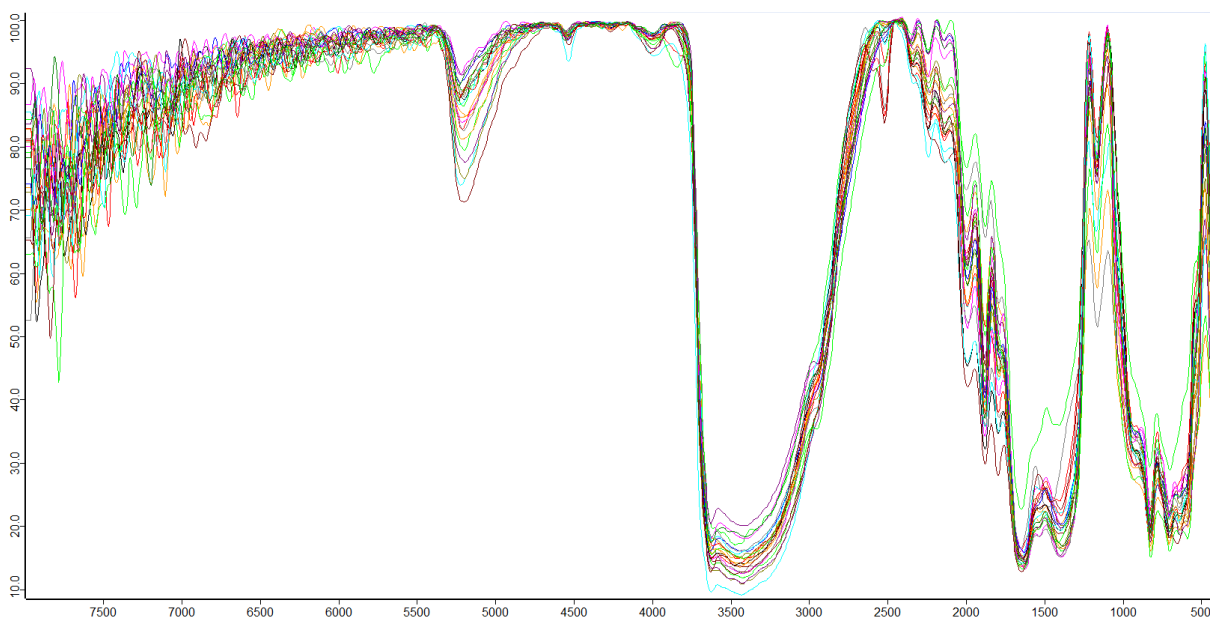
Z grafů č. 25 a 26 lze opět vyčíst horší situaci pro lokalitu Třinec. V obou lokalitách došlo k několikanásobnému překročení mezní hodnoty koncentrace zinku v půdě, která je v grafech znázorněna červenou linií a je dána vyhláškou 437/2016 Sb. (120 mg.kg^{-1} sušiny). Nejen že byl pro Třinec počet překročení o něco větší, ale hodnoty dosahovaly také vyšších koncentrací. Hodnota koncentrace $485,4 \text{ mg.kg}^{-1}$ se dosáhla u vzorku T13, kdežto maximální stanovená hodnota koncentrace pro lokalitu Ostrava byla u vzorku O8, která činila „jen“ $285,5 \text{ mg.kg}^{-1}$. Nejnižší hodnoty koncentrace byly naměřeny v lokalitě Ostrava a pohybovaly se kolem $50,0 \text{ mg.kg}^{-1}$.

4.5 Vyhodnocení měření IČ

Měření bylo provedeno pomocí přístroje Alpha II s modulem DRIFT s upravenými vzorky půdy na frakci 0,5 mm dle postupu uvedeného v kapitole 3.9. Spektra jsou zobrazena na obrázcích č. 9 a 10. Osa Y, uváděná v procentech, přísluší transmitanci a osa X přísluší vlnočtu uváděných v jednotkách cm^{-1} . Data byla následně použita pro vytvoření korelačních modelů, které jsou uvedeny v kapitole 4.5.1.



Obr. č. 9: Infračervená spektra vzorků z O1–O26

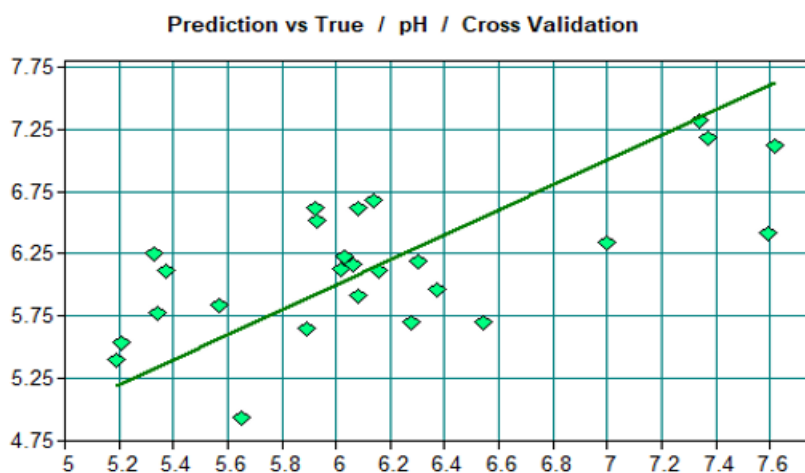


Obr. č. 10: Infračervená spektra vzorků z T1–T26

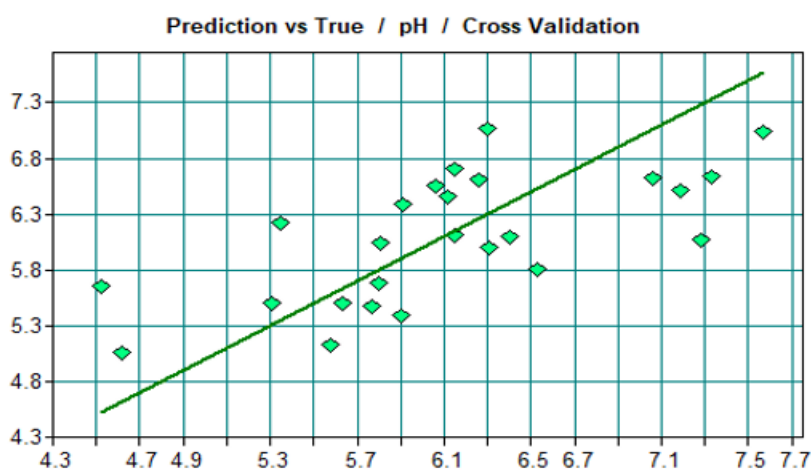
V IČ spektrech byly pozorovány charakteristické pásy v oblastech 3682–3460, 2562–2480, 2000–1790 cm^{-1} v oblasti skupinových (charakteristických) vibrací a v oblastech 1479–1408, 1238–1070, 820–752, 720–650 cm^{-1} v oblasti otisku prstu, které odpovídají částicím běžně se vyskytujícím v půdách, jako jsou například hlinitokřemičitany, uhličitany, oxidy železa, kaolinit, bentonit nebo kalcit.

4.5.1 Vyhodnocení korelačních modelů

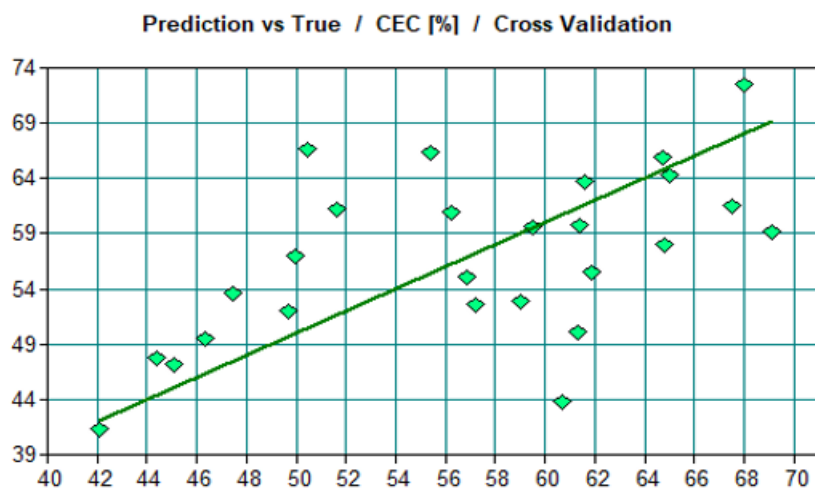
Pro vytvoření korelačních modelů se využila funkce *Quant 2* v programu OPUS 8.1, kdy komponentou byla vždy jedna ze stanovovaných hodnot (pH, KVK či koncentrace jednotlivých kovů) v závislosti na IČ spektru vzorků z lokality Ostravy nebo Třince. Pro tzv. cross (křížovou) validaci se využila optimalizace pro oblasti 2612–2257, 2072–1927, 1717–1559, 1230–1099 a 928–743 cm^{-1} . Nejlepší predikční model je definován vyššími hodnotami korelačního koeficientu R^2 . Exaktní hranice korelačního koeficientu pro dobrou predikci není přesně stanovena, avšak ve většině vědeckých publikací se uvádí, že hodnoty s R^2 vyšší jak 0,60 se jeví jako dobré predikční modely a jako výborné se označují predikční modely s hodnotami R^2 vyšší jak 0,80 [58, 59]. Vybrané korelační modely jsou uvedeny v grafech č. 27–36.



Graf č. 27: Korelační model pH se vzorky z lokality Ostrava

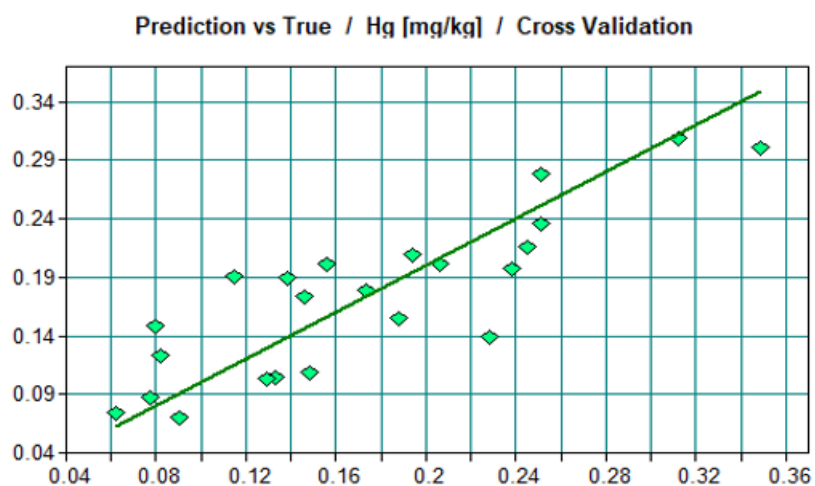


Graf č. 28: Korelační model pH se vzorky z lokality Třinec

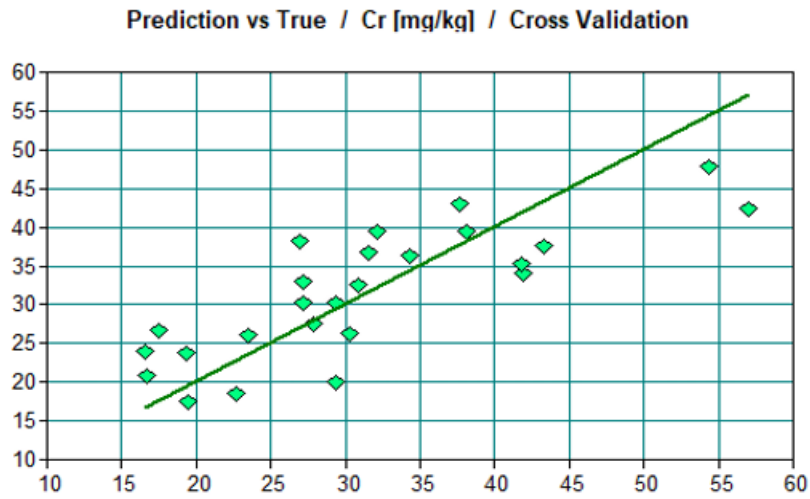


Graf č. 29: Korelační model KVK se vzorky z lokality Třinec

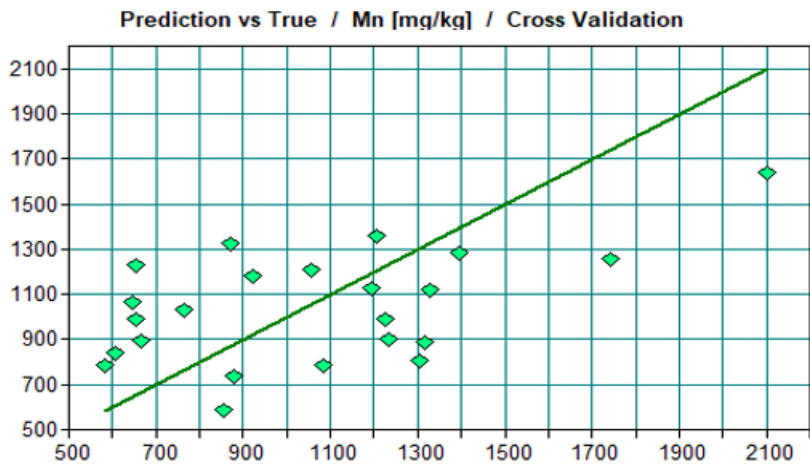
Přijatelných výsledků bylo dosaženo u korelačních modelů s pH u obou lokalit. Korelační modely jsou zobrazeny v grafech č. 27 a 28. Pro lokalitu Ostrava vyšel korelační koeficient 0,43 a obdobně v případě lokality Třinec s hodnotou $R^2 = 0,44$. U výsledků korelačních modelů s KVK bylo v obou případech dosaženo špatné predikce. Na grafu č. 29 je zobrazen korelační model KVK z lokality Třinec, přičemž se u obou modelů korelační koeficienty pohybovaly pod hodnotou 0,20.



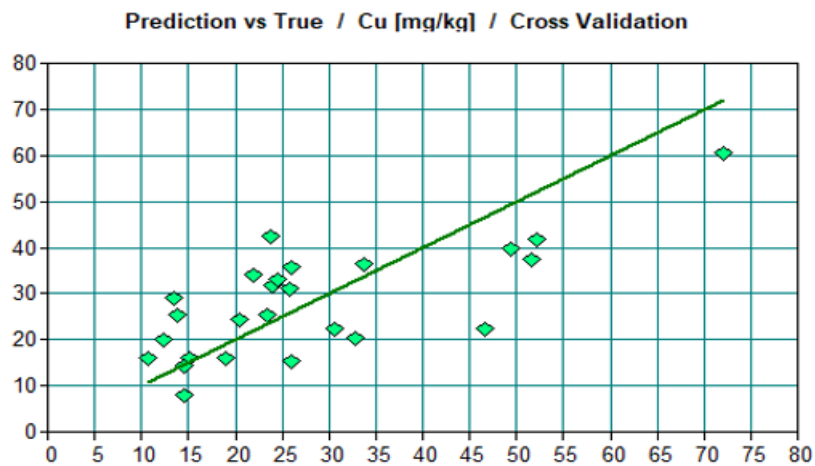
Graf č. 30: Korelační model rtuti se vzorky z lokality Ostrava



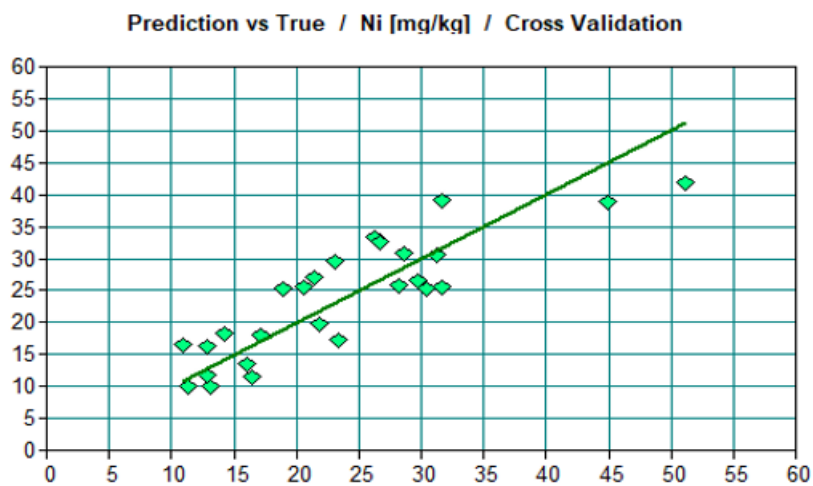
Graf č. 31: Korelační model chromu se vzorky z lokality Ostrava



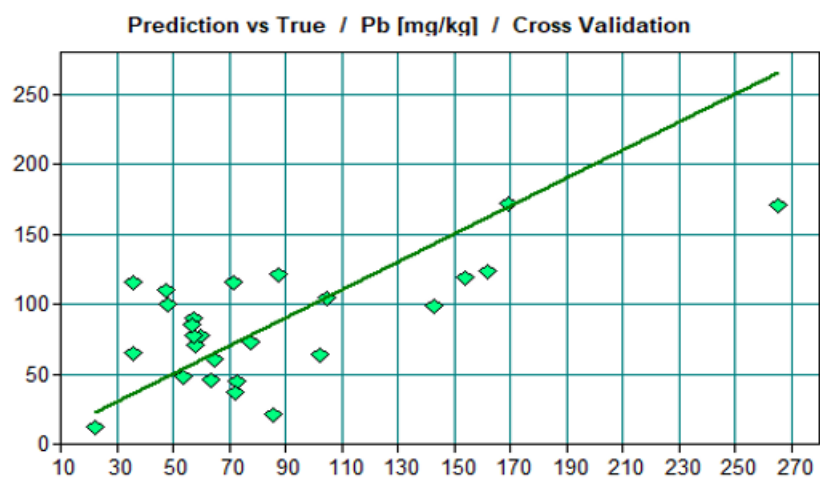
Graf č. 32: Korelační model manganu se vzorky z lokality Třinec



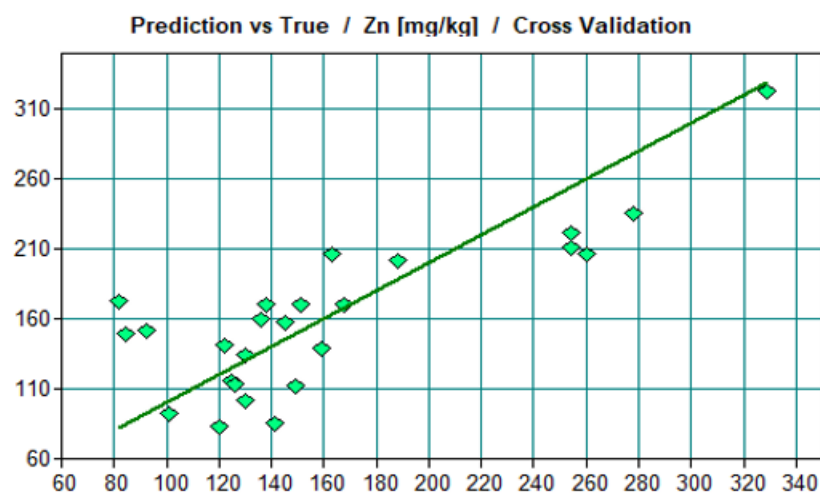
Graf č. 33: Korelační model mědi se vzorky z lokality Třinec



Graf č. 34: Korelační model niklu se vzorky z lokality Ostrava



Graf č. 35: Korelační model olova se vzorky z lokality Třinec



Graf č. 36: Korelační model zinku se vzorky z lokality Třinec

Výsledky korelačních modelů u jednotlivých kovů lze zařadit do 3 skupin. První skupina zahrnuje dobré predikční modely, druhá skupina přijatelné predikční modely a do poslední třetí skupiny patří nepoužitelné predikční modely.

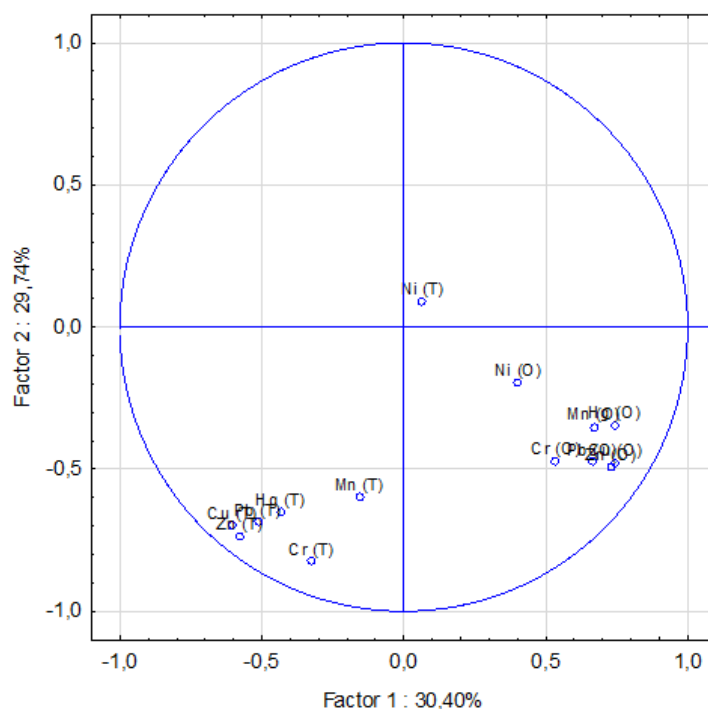
První skupině přísluší korelační modely z lokality Ostrava pro rtuť, chrom a nikl (grafy č. 30, 31 a 34). Korelační koeficient u modelu s niklem byl až 0,74. R^2 u modelu rtuti se rovnal 0,72 a pro model chromu se rovnal hodnotě 0,64. Výsledek u korelačního modelu pro zinek z lokality Třinec, který je zobrazen v grafu č. 36, byl také dobrý. Hodnota R^2 dosahovala rovněž 0,64.

Do druhé skupiny patří korelační modely z lokality Třinec. Jedná se o modely chromu, mědi a olova. Na grafu č. 33 můžeme vidět korelační model mědi, kdy se hodnotou $R^2 = 0,51$ a na grafu č. 35 korelační model olova, kdy se korelační koeficient rovnal 0,42. Pro případ modelu chromu z lokality Třinec vycházel $R^2 = 0,54$.

Na grafu č. 32 můžeme vidět korelační model pro mangan z lokality Třinec. Kvůli své nízké hodnotě $R^2 = 0,25$ se řadí mezi nepoužitelné modely společně se zbylými, výše neuvedenými korelačními modely.

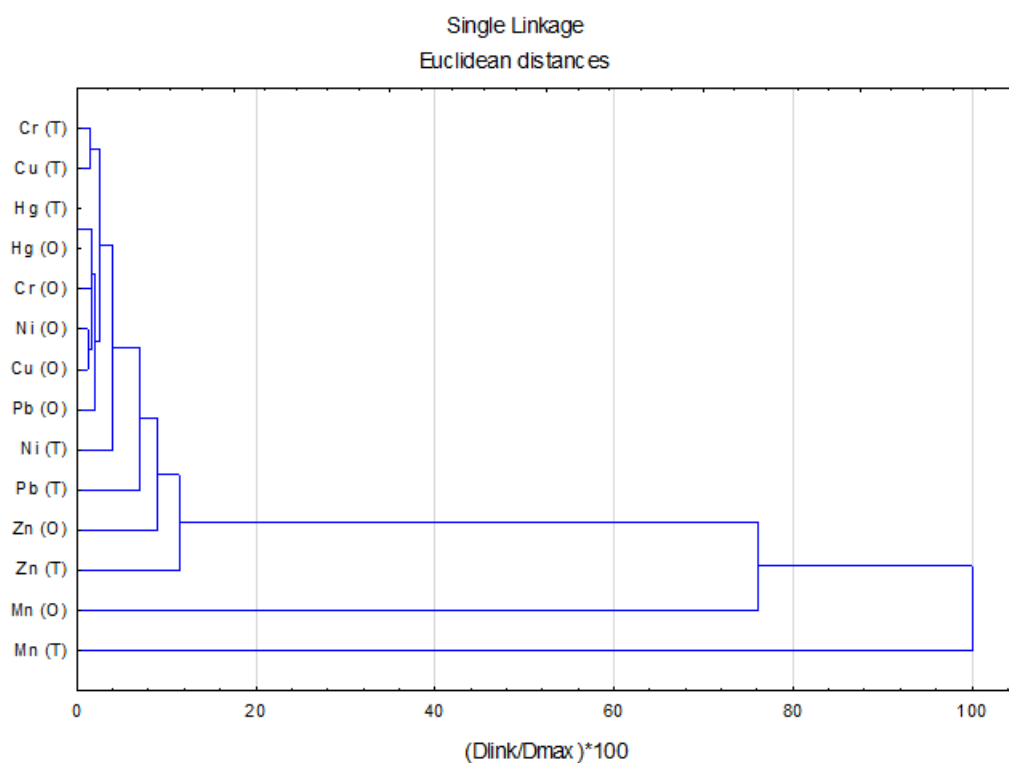
4.6 Analýza hlavních komponent (PCA) a klastrová analýza (CA)

Statistické metody PCA a CA byly provedeny v programu Statistica. Jako hlavní komponenta pro hodnocení byly použity výsledné koncentrace kovů z obou lokalit. Výsledky jsou zobrazeny v grafech č. 37 a 38 a v tabulkách č. 9 a 10.



Graf č. 37: PCA graf vybraných kovů z obou lokalit

Výsledky získané analýzou PCA ukázaly, že v celkovém rozptylu obou lokalit se první faktor (F1) rovnal 30,40 % a druhý faktor (F2) se rovnal 29,74 % celkovému rozptylu. Z grafu č. 37 je patrné, že se kovy rozdělily do dvou hlavních skupin dle lokality odběru. Jemné nuance byly pozorovány u vzorků chromu a manganu z lokality Třince a u vzorků niklu z lokality Ostrava. U vzorků niklu z lokality Třince, které do zmíněných skupin nepatří, lze nepřímo usuzovat, že se v dané oblasti vyskytuje jiný zdroj znečištění.



Graf č. 38: CA graf vybraných kovů z obou lokalit

Proměnná	Cr (O)	Hg (O)	Ni (O)	Cu (O)	Pb (O)	Zn (O)	Mn (O)
Cr (O)	1,000	0,474	0,170	0,757	0,373	0,507	0,446
Hg (O)	0,474	1,000	0,259	0,707	0,636	0,624	0,574
Ni (O)	0,170	0,259	1,000	0,537	0,208	0,409	0,055
Cu (O)	0,757	0,707	0,537	1,000	0,514	0,721	0,455
Pb (O)	0,373	0,636	0,208	0,514	1,000	0,739	0,821
Zn (O)	0,507	0,624	0,409	0,721	0,739	1,000	0,604
Mn (O)	0,446	0,574	0,055	0,455	0,821	0,604	1,000

Tab. č. 9: Výsledné hodnoty korelační matice pro lokalitu Ostrava

Proměnná	Cr (T)	Hg (T)	Ni (T)	Cu (T)	Pb (T)	Zn (T)	Mn (T)
Cr (T)	1,000	0,510	-0,101	0,799	0,555	0,821	0,615
Hg (T)	0,510	1,000	-0,082	0,609	0,894	0,582	0,273
Ni (T)	-0,101	-0,082	1,000	-0,245	-0,164	-0,062	0,389
Cu (T)	0,799	0,609	-0,245	1,000	0,740	0,893	0,400
Pb (T)	0,555	0,894	-0,164	0,740	1,000	0,712	0,315
Zn (T)	0,821	0,582	-0,062	0,893	0,712	1,000	0,546
Mn (T)	0,615	0,273	0,389	0,400	0,315	0,546	1,000

Tab. č. 10: Výsledné hodnoty korelační matice pro lokalitu Třinec

V grafu č. 38 můžeme pozorovat výsledky klastrové analýzy, které identifikovaly několik společných vztahů ve zkoumaných lokalitách, kdy kovy spojené ve skupině mohou odpovídat stejnému zdroji znečištění. Pro lokalitu Ostrava klastrová analýza potvrdila skupinu přidružených kovů mědi a niklu, na kterou navazovaly kovy: chrom, olovo a rtuť. Další skupina přidružených kovů chromu a mědi byla pozorována u lokality Třinec.

Výsledky korelačních matic (tabulky č. 9 a 10) také identifikovala podobné vztahy mezi analyzovanými kovy. U lokality Ostrava byly sledovány velmi silné korelace u kovů Pb–Mn (0,821) následovanými Cu–Cr (0,757) a Cu–Hg (0,707) nebo Zn–Cu (0,721) a Zn–Pb (0,739). Silné korelace byly rovněž sledovány u lokality Třinec a to u kovů Zn–Cr (0,821) a Zn–Cu (0,893). Silné korelace byly potvrzeny i u kovů Pb–Hg (0,894), Pb–Cu (0,740) a Cu–Cr (0,799).

5 ZÁVĚR

Tato diplomová práce byla zaměřena na forenzní multivariační analýzu půd ze dvou vybraných lokalit pomocí metody infračervené spektrometrie. Jedná se o oblasti u hutních společností Liberty Ostrava a Třinecké železářny.

V každé lokalitě bylo odebráno 26 vzorků půd, u kterých bylo stanoveno pH a KVK. Dále se u vzorků stanovila koncentrace rtuti na přístroji AMA 254. Koncentrace dalších vybraných kovů (chrom, mangan, měď, nikl, olovo a zinek) byly stanoveny v extraktech totálního rozkladu pomocí metody F-AAS na přístroji ContrAA 300. U vzorků proběhlo také měření IČ metodou FTIR na přístroji Alpha II s modulem DRIFT.

Hodnoty pH, které byly stanoveny u půdních vzorků extraktu 0,01 M chloridu vápenatého, se u většiny vzorků obou lokalit pohybovaly v mírně kyselé oblasti v rozmezí od 7,50 do 5,30. S klesajícími hodnotami pH se zvyšuje mobilita kovů v půdě. V případě nejnižších naměřených hodnot pH (vzorky T4 a T9, pH 4,62 resp. 4,52) můžeme konstatovat, že se stanovené koncentrace kovů vzdalují skutečnému obsahu více, než je tomu v ostatních případech. Díky stanovení KVK můžeme u většiny vzorků zařazených do kategorie nasycených půd, společně s vysokou maximální sorpční kapacitou, nepřímou usuzovat, že by mohly zadržovat více znečišťujících látek.

Výsledky obsahů kovů ukázaly, že kvůli většímu počtu překročení mezních hodnot kovů byl Třinec označen za více kontaminovanou lokalitu. Mezní hodnoty byly překročeny 43krát pro lokalitu Třinec, kdežto v lokalitě Ostrava „pouze“ 17krát. Nejhuře dopadla situace u obsahů olova a zinku. Rozdíl můžeme pozorovat u hodnot koncentrací mědi, protože u lokality Ostrava mezní hodnota nebyla překročena. U chromu a rtuti byl počet překročení pro obě lokality stejný (1krát pro chrom a 4krát pro rtuť). Nejlépe dopadlo stanovení niklu, kde ani v jednom případě nedošlo k překročení mezní hodnoty. V případě obsahu manganu byly naměřeny vyšší hodnoty koncentrací ve vzorcích z lokality Třinec. Z pohledů jednotlivých vzorků se mezi nejvíce kontaminované řadily vzorky O8, O20, O22 a vzorky T1, T2, T13, T25. Tyto vzorky (mimo vzorek O20) byly odebrány v těsné blízkosti zmíněných hutních společností.

Pro vytvoření korelačních modelů byly použity jak data stanovovaných hodnot koncentrací jednotlivých kovů, tak i hodnot pH a KVK v závislosti na změřených IČ spektrech vzorků z obou lokalit. Nejlepšího výsledku bylo dosaženo u predikčního modelu korelace s niklem z lokality Ostrava, u kterého se hodnota korelačního koeficientu R^2 rovnala 0,74. Také s modely kovů rtuti a chromu z lokality Ostrava a zinku z lokality Třinec se dosáhlo dobrých výsledků, které přesahovaly hodnotu R^2 0,64. O přijatelných výsledcích lze hovořit i v případě korelačních modelů chromu, mědi a olova z lokality Ostrava. O zbylých korelačních modelech lze říct, že se pro predikci vlastností půd nedají použít. Reálnější modely vyžadují daleko větší množství analyzovaných vzorků vzhledem k dané lokalitě, aby došlo k minimalizaci odchylek v predikčních modelech.

Výsledky statistického grafu PCA, ve kterém došlo k rozdělení na dvě hlavní skupiny, potvrdily pro většinu kovů (kromě niklu) společný zdroj znečištění daných lokalit odběrů.

Klastrová analýza (CA) dále potvrdila společné vzájemné vztahy mezi kovy mědi a niklu z lokality Ostrava a chromu a mědi z lokality Třinec.

6 SEZNAM POUŽITÝCH ZDROJŮ

- [1] *Statutární město Ostrava: oficiální portál města Ostrava* [online]. Copyright © 2020 [cit. 01.04.2020]. Dostupné z: <https://www.ostrava.cz/cs>
- [2] *OstravaInfo – oficiální průvodce Ostravou* [online]. Copyright © 2016 [cit. 01.04.2020]. Dostupné z: <https://www.ostrava.info.cz/>
- [3] *Liberty Ostrava a.s.* [online]. Dostupné z: <https://www.libertyostrava.cz/>
- [4] *Nejdůvěryhodnější zpravodajský web v ČR – Česká televize* [online]. Copyright © [cit. 03.04.2020]. Dostupné z: <https://ct24.ceskatelevize.cz/>
- [5] LAPISZ, B. Ostrava se snad nadechne, huť má nový filtr za miliardu. *www.denik.cz* [online]. 2011-10-22 [cit. 01.04.2020]. Dostupné z: https://moravskoslezsky.denik.cz/zpravy_region/arcelormittal-filtr20111022.html
- [6] KNITL, M. Mittal v Ostravě montuje filtr za miliardu. Má se zlepšit ovzduší. *www.rozhlas.cz* [online]. 2012-10-21 [cit. 01.04.2020]. Dostupné z: https://www.irozhlas.cz/regiony/mittal-v-ostrove-montuje-filtr-za-miliardu-ma-se-zlepsit-ovzdusi_201110210811_jpiroh
- [7] PLEVA, M. Škodíme méně, než se říká, tvrdí ArcelorMittal Ostrava. *www.denik.cz* [online]. 2012-04-05 [cit. 01.04.2020]. Dostupné z: <https://www.denik.cz/moravskoslezsky-kraj/skodime-mene-nez-se-rika-tvrdi-arcelormittal-ostrava-ma-pravdu-20120404-uf3k.html>
- [8] *Statutární město Třinec: Titulní stránka* [online]. Dostupné z: <https://www.trinecko.cz/index.asp>
- [9] *Úvod | Třinecké Železárny – Moravia Steel.* [online]. Copyright © TŘINECKÉ ŽELEZÁRNY [cit. 02.04.2020]. Dostupné z: <https://www.trz.cz/hlavni-stranka/1/uvod>
- [10] *Ministerstvo životního prostředí* [online]. Copyright © 2008 [cit. 02.04.2020]. Dostupné z: <https://www.mzp.cz/>
- [11] *Portál ČHMÚ: Home* [online]. Dostupné z: <http://portal.chmi.cz/>
- [12] CHESWORTH, W. *Encyclopedia of soil science*. Dordrecht, Netherlands: Springer, 2008. *Encyclopedia of earth sciences series* (Springer (Firm)). ISBN 978-1-4020-3994-2.
- [13] KALEV, S. D.; TOOR, G. S. The Composition of Soils and Sediments. In: *Green Chemistry*. Elsevier, 2018. p. 339-357.
- [14] HILLEL, D. *Soil in the environment: crucible of terrestrial life*. Boston: Elsevier/Academic Press, 2008. ISBN 978-0-1234-8536-6.
- [15] NĚMEČEK, J. The Czech taxonomic soil classification system and the harmonization of soil maps.
- [16] NĚMEČEK, J. Jednotná klasifikace půd. *Rostl. Věr*, 2002, 48: 327-328.
- [17] PHOGAT, V. K.; TOMAR, V. S.; DAHIYA, R. I. T. A. Soil physical properties. *Soil science: an introduction*. Indian Society of Soil Sciences, 2015, 135-171.

- [18] McKENDRY, P. (2019). SOIL CLASSIFICATION Definition. 10.13140/RG.2.2.20480.58883.
- [19] TABOR, N. J.; MYERS, T. S.; MICHEL, L. A. Sedimentologist's guide for recognition, description, and classification of paleosols. In: *Terrestrial Depositional Systems*. Elsevier, 2017. p. 165-208.
- [20] DURÃES, N., et al. Distribution, Transport and Fate of Pollutants. In: *Soil Pollution*. Academic Press, 2018. p. 29-57.
- [21] ARSHAD, M. A.; LOWERY, B.; GROSSMAN, B. Physical tests for monitoring soil quality. *Methods for assessing soil quality*, 1997, 49: 123-141.
- [22] BROWN, K.; LEMON, J. Cations and cation exchange capacity. *U. o. WA at D. o. A. a. Food, editor. [http://www. soilquality. org. au/factsheets/cation-exchangecapacity](http://www.soilquality.org.au/factsheets/cation-exchangecapacity). Soil Quality, West Australia*, 2015.
- [23] PIETRI, J. A.; BROOKES, P. C. Relationships between soil pH and microbial properties in a UK arable soil. *Soil Biology and Biochemistry*, 2008, 40.7: 1856-1861.
- [24] VORONEY, R. P.; HECK, R. J. The soil habitat. In: *Soil microbiology, ecology and biochemistry*. 2007.
- [25] SPARKS, D. L. *Environmental soil chemistry*. Elsevier, 2003.
- [26] MCCARTY, G. W.; REEVES, J. B. Comparison of near infrared and mid infrared diffuse reflectance spectroscopy for field-scale measurement of soil fertility parameters. *Soil Science*, 2006, 171.2: 94-102.
- [27] NANNI, M. R.; DEMATTÊ, J. A. M. Spectral reflectance methodology in comparison to traditional soil analysis. *Soil Science Society of America Journal*, 2006, 70.2: 393-407.
- [28] ROSSEL, R. V., et al. Visible, near infrared, mid infrared or combined diffuse reflectance spectroscopy for simultaneous assessment of various soil properties. *Geoderma*, 2006, 131.1-2: 59-75.
- [29] DEMATTÊ, J. A., et al. Visible–NIR reflectance: a new approach on soil evaluation. *Geoderma*, 2004, 121.1-2: 95-112.
- [30] MARGENOT, A. J., et al. IR Spectroscopy, soil analysis applications. In: *Encyclopedia of spectroscopy and spectrometry*. Elsevier Inc., 2016. p. 448-454.
- [31] GRIFFITHS, P. R.; MP, F. Mid-infrared spectrometry of powdered samples. 1982.
- [32] YANG, H.; MOUAZEN, A. M. Vis/near and mid-infrared spectroscopy for predicting soil N and C at a farm scale. *Infrared Spectroscopy—Life and Biomedical Sciences*, 2012, 185-210.
- [33] How Does FT-IR DRIFTS Sample Handling Work for Polymers?. [online]. Copyright © 2020 [cit. 11.04.2020]. Dostupné z: <https://www.thermofisher.com/blog/materials/catch-my-drifts/>

- [34] RAPHAEL, L. Application of FTIR spectroscopy to agricultural soils analysis. *Fourier Transforms—New Analytical Approaches and FTIR Strategies*, 2011, 385-404.
- [35] KUBELKA, P. Ein Beitrag zur Optik der Farbanstriche (Contribution to the optic of paint). *Zeitschrift für technische Physik*, 1931, 12: 593-601.
- [36] DU, C.; ZHOU, J. Evaluation of Soil Fertility Using Infrared Spectroscopy—A Review. In: *Climate Change, Intercropping, Pest Control and Beneficial Microorganisms*. Springer, Dordrecht, 2009. p. 453-483.
- [37] LEUE, M., et al. Impact of soil microstructure geometry on DRIFT spectra: Comparisons with beam trace modeling. *Soil Science Society of America Journal*, 2010, 74.6: 1976-1986.
- [38] TINTI, A., et al. Recent applications of vibrational mid-infrared (IR) spectroscopy for studying soil components: a review. *Journal of Central European Agriculture*, 2015, 16.1: 0-0.
- [39] REEVES, J. B.; SMITH, D. B. The potential of mid-and near-infrared diffuse reflectance spectroscopy for determining major-and trace-element concentrations in soils from a geochemical survey of North America. *Applied Geochemistry*, 2009, 24.8: 1472-1481.
- [40] LINKER, R., et al. Fourier transform infrared—attenuated total reflection nitrate determination of soil pastes using principal component regression, partial least squares, and cross-correlation. *Applied spectroscopy*, 2004, 58.5: 516-520.
- [41] BERTRAND, I., et al. The rapid assessment of concentrations and solid phase associations of macro-and micronutrients in alkaline soils by mid-infrared diffuse reflectance spectroscopy. *Soil Research*, 2002, 40.8: 1339-1356.
- [42] JANIK, L. J.; FORRESTER, S. T.; RAWSON, A. The prediction of soil chemical and physical properties from mid-infrared spectroscopy and combined partial least-squares regression and neural networks (PLS-NN) analysis. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2009, 97.2: 179-188.
- [43] MASSERSCHMIDT, I., et al. Determination of organic matter in soils by FTIR/diffuse reflectance and multivariate calibration. *Journal of Chemometrics*, 1999, 13.3-4: 265-273.
- [44] CAÑASVERAS, J. C., et al. Estimation of aggregate stability indices in Mediterranean soils by diffuse reflectance spectroscopy. *Geoderma*, 2010, 158.1-2: 78-84.
- [45] YANG, H.; KUANG, B.; MOUAZEN, A. M. Quantitative analysis of soil nitrogen and carbon at a farm scale using visible and near infrared spectroscopy coupled with wavelength reduction. *European Journal of Soil Science*, 2012, 63.3: 410-420.
- [46] WIJEWARDANE, N. K., et al. Predicting physical and chemical properties of US soils with a mid-infrared reflectance spectral library. *Soil Science Society of America Journal*, 2018, 82.3: 722-731.

- [47] MOUAZEN, A. M., et al. Comparison among principal component, partial least squares and back propagation neural network analyses for accuracy of measurement of selected soil properties with visible and near infrared spectroscopy. *Geoderma*, 2010, 158.1-2: 23-31.
- [48] CONZEN, J. P. Multivariate calibration: a practical guide for the method development in the analytical chemistry. *Bruker Optik GmbH, Ettlingen, Germany*, 2003.
- [49] BONETT, J. P.; CAMACHO-TAMAYO, J. H.; RAMÍREZ-LÓPEZ, L. Mid-infrared spectroscopy for the estimation of some soil properties. *Agronomía Colombiana*, 2015, 33.1: 99-106.
- [50] MA, F., et al. A self-adaptive model for the prediction of soil organic matter using mid-infrared photoacoustic spectroscopy. *Soil Science Society of America Journal*, 2016, 80.1: 238–246.
- [51] MA, F., et al. Investigation of soil properties using different techniques of mid-infrared spectroscopy. *European journal of soil science*, 2019, 70.1: 96-106.
- [52] *Mapy.cz* [online]. Dostupné z: <https://www.mapy.cz/>
- [53] ZBÍRAL, J., et al. Analýza půd. *Ústřední kontrolní a zkušební ústav zemědělský*, 2002.
- [54] REJŠEK, K. Lesnická pedologie: cvičení. *Mendelova zemědělská a lesnická univerzita*, 1999.
- [55] RAURET, G., et al. Improvement of the BCR three step sequential extraction procedure prior to the certification of new sediment and soil reference materials. *Journal of Environmental Monitoring*, 1999, 1.1: 57-61.
- [56] AMA-254.png – Symalab. *Symalab - Fabricant et distributeur pour laboratoires*. [online]. Copyright © [cit. 27.04.2020]. Dostupné z: <https://www.symalab.fr/analyseur-de-mercure-altec-ama-254/ama-254-png/>
- [57] High-performance scientific instruments and solutions for molecular and materials research, as well as for industrial and applied analysis. *Bruker*. [online]. Copyright © Copyright Bruker 2020 [cit. 22.04.2020]. Dostupné z: <https://www.bruker.com/>
- [58] SILA, A. M.; SHEPHERD, K. D.; POKHARIYAL, G. P. Evaluating the utility of mid-infrared spectral subspaces for predicting soil properties. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2016, 153: 92-105.
- [59] ZORNOZA, R., et al. Near infrared spectroscopy for determination of various physical, chemical and biochemical properties in Mediterranean soils. *Soil Biology and Biochemistry*, 2008, 40.7: 1923-1930.

7 SEZNAM POUŽITÝCH ZKRATEK A SYMBOLŮ

ČR – Česká republika

TZL – Tuhé znečišťující látky

VOC – Těkavé organické látky

ČOV – Čistírna odpadních vod

KVK – Kationtová výměnná kapacita (angl. CEC – Cation-exchange capacity)

FTIR – Infračervená spektrometrie s Fourierovou transformací

ATR – Zeslabená úplná reflektance – technika FTIR

DRIFT – Difúzní reflektance – technika FTIR

R^2 – Korelační koeficient

PLSR – Metoda regrese nejmenších čtverců

SAM-PLS – Self-adaptive partial least squares model

F-AAS – Atomový absorpční spektrometr s atomizací v plameni

LOD – Mez detekce

Smdoch – Směrodatná odchylka

RSD – Relativní směrodatná odchylka

PCA – Analýza hlavních komponent

CA – Klastrová analýza

8 SEZNAM PŘÍLOH

- **Příloha č. 1:** Tabulka s naměřenými hodnotami pH
- **Příloha č. 2:** Tabulka s vyhodnocením stanovení rtuti [mg.kg^{-1}]
- **Příloha č. 3:** Tabulka s vyhodnocením stanovení chromu v extraktu totálního rozkladu [mg.kg^{-1}]
- **Příloha č. 4:** Tabulka s vyhodnocením stanovení manganu v extraktu totálního rozkladu [mg.kg^{-1}]
- **Příloha č. 5:** Tabulka s vyhodnocením stanovení mědi v extraktu totálního rozkladu [mg.kg^{-1}]
- **Příloha č. 6:** Tabulka s vyhodnocením stanovení niklu v extraktu totálního rozkladu [mg.kg^{-1}]
- **Příloha č. 7:** Tabulka s vyhodnocením stanovení olova v extraktu totálního rozkladu [mg.kg^{-1}]
- **Příloha č. 8:** Tabulka s vyhodnocením stanovení zinku v extraktu totálního rozkladu [mg.kg^{-1}]

9 PŘÍLOHY

Příloha č. 1: Tabulka s naměřenými hodnotami pH

Vzorek	pH	Vzorek	pH
O1	7,59	T1	7,19
O2	6,54	T2	7,06
O3	6,30	T3	7,33
O4	5,37	T4	4,62
O5	6,14	T5	6,53
O6	7,37	T6	7,57
O7	6,37	T7	5,35
O8	7,00	T8	7,57
O9	7,62	T9	4,52
O10	7,34	T10	7,28
O11	5,33	T11	5,80
O12	6,16	T12	6,15
O13	6,28	T13	6,30
O14	6,08	T14	6,15
O15	5,34	T15	5,63
O16	5,93	T16	5,58
O17	6,06	T17	6,31
O18	6,02	T18	5,77
O19	5,21	T19	6,12
O20	5,19	T20	6,26
O21	5,57	T21	6,06
O22	5,89	T22	6,40
O23	5,92	T23	5,31
O24	6,03	T24	5,81
O25	6,08	T25	5,90
O26	5,65	T26	5,91

Příloha č. 2: Tabulka s vyhodnocením stanovení rtuti [mg.kg⁻¹]

Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]	Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]
O1	0,231	0,228	0,009	4,0	T1	0,509	0,494	0,056	11,0
O2	0,196	0,194	0,003	1,5	T2	1,220	1,236	0,044	3,6
O3	0,091	0,090	0,005	5,4	T3	0,196	0,197	0,014	6,9
O4	0,150	0,146	0,007	4,6	T4	0,178	0,175	0,008	4,6
O5	0,115	0,115	0,003	3,0	T5	0,233	0,235	0,003	1,2
O6	0,218	0,206	0,018	8,3	T6	0,076	0,064	0,017	22,9
O7	0,158	0,156	0,004	2,8	T7	0,155	0,156	0,003	2,2
O8	0,358	0,349	0,014	3,9	T8	0,082	0,085	0,007	9,0
O9	0,245	0,238	0,016	6,6	T9	0,119	0,118	0,001	0,7
O10	0,067	0,062	0,009	13,1	T10	0,146	0,150	0,014	9,7
O11	0,135	0,133	0,004	3,0	T11	0,259	0,249	0,015	5,8
O12	0,078	0,077	0,003	4,0	T12	0,160	0,157	0,010	6,3
O13	0,085	0,082	0,004	5,1	T13	0,375	0,376	0,012	3,2
O14	0,104	0,101	0,004	4,1	T14	0,303	0,300	0,007	2,4
O15	0,259	0,251	0,016	6,1	T15	0,159	0,154	0,009	5,8
O16	0,499	0,508	0,022	4,4	T16	0,165	0,163	0,007	4,0
O17	0,189	0,188	0,004	1,9	T17	0,248	0,228	0,028	11,2
O18	0,193	0,173	0,028	14,6	T18	0,121	0,118	0,004	3,3
O19	0,131	0,129	0,004	3,0	T19	0,203	0,204	0,008	3,8
O20	0,315	0,312	0,013	4,0	T20	0,296	0,288	0,019	6,4
O21	0,246	0,245	0,007	2,7	T21	0,123	0,123	0,002	1,4
O22	0,389	0,391	0,013	3,2	T22	0,068	0,070	0,004	5,8
O23	0,081	0,080	0,001	1,2	T23	0,181	0,186	0,007	4,0
O24	0,141	0,138	0,011	8,0	T24	0,164	0,170	0,011	7,0
O25	0,252	0,251	0,006	2,5	T25	0,346	0,349	0,004	1,2
O26	0,148	0,148	0,000	0,1	T26	0,189	0,162	0,042	22,5

Příloha č. 3: Tabulka s vyhodnocením stanovení chromu v extraktu totálního rozkladu [mg.kg⁻¹]

Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]	Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]
O1	27,9	28,4	0,530	1,9	T1	58,0	58,8	2,552	4,4
O2	41,9	42,8	0,168	0,4	T2	74,7	74,4	3,137	4,2
O3	19,5	19,8	0,156	0,8	T3	39,1	39,1	0,860	2,2
O4	23,5	23,9	0,635	2,7	T4	24,0	24,5	0,360	1,5
O5	32,1	32,0	0,417	1,3	T5	37,6	38,4	2,482	6,6
O6	37,6	38,4	2,030	5,4	T6	40,1	40,2	0,561	1,4
O7	34,3	34,4	0,617	1,8	T7	21,4	21,7	0,492	2,3
O8	54,3	54,8	0,652	1,2	T8	68,1	68,4	2,111	3,1
O9	57,0	57,8	1,425	2,5	T9	28,3	28,2	0,708	2,5
O10	29,3	29,9	0,352	1,2	T10	34,0	34,2	1,054	3,1
O11	16,7	16,7	0,501	3,0	T11	21,5	21,6	0,581	2,7
O12	22,7	22,8	0,545	2,4	T12	38,2	38,4	0,993	2,6
O13	29,3	29,2	0,938	3,2	T13	98,7	98,9	1,875	1,9
O14	38,1	38,5	0,991	2,6	T14	42,6	42,9	0,511	1,2
O15	30,3	31,1	0,485	1,6	T15	33,3	33,7	0,932	2,8
O16	31,5	31,9	1,355	4,3	T16	34,5	34,6	1,484	4,3
O17	27,2	27,9	0,190	0,7	T17	25,1	25,1	0,226	0,9
O18	30,8	31,2	0,585	1,9	T18	24,2	24,3	1,307	5,4
O19	19,3	19,6	0,212	1,1	T19	38,5	39,2	0,462	1,2
O20	103,0	103,0	1,545	1,5	T20	34,6	35,2	0,484	1,4
O21	41,8	42,5	0,418	1,0	T21	26,0	26,0	0,988	3,8
O22	43,3	43,9	0,823	1,9	T22	23,4	23,6	0,351	1,5
O23	17,5	17,8	0,473	2,7	T23	15,2	15,3	0,213	1,4
O24	27,2	27,9	0,490	1,8	T24	20,8	20,9	1,331	6,4
O25	26,9	27,3	0,350	1,3	T25	16,3	16,7	1,174	7,2
O26	16,6	16,7	0,548	3,3	T26	14,2	14,5	0,568	4,0

Příloha č. 4: Tabulka s vyhodnocením stanovení manganu v extraktu totálního rozkladu [mg.kg⁻¹]

Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]	Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]
O1	894,0	890,0	10,728	1,2	T1	1396,0	1396,8	19,544	1,4
O2	948,0	957,2	7,584	0,8	T2	2101,0	2141,6	50,424	2,4
O3	641,0	637,8	16,025	2,5	T3	870,0	885,1	2,610	0,3
O4	757,0	754,3	11,355	1,5	T4	1082,0	1085,1	7,574	0,7
O5	700,0	704,4	16,800	2,4	T5	582,0	593,6	9,894	1,7
O6	684,0	692,6	0,684	0,1	T6	856,0	853,4	5,992	0,7
O7	1113,0	1130,7	7,791	0,7	T7	606,0	622,1	14,544	2,4
O8	1212,0	1218,8	7,272	0,6	T8	3517,0	3513,7	31,653	0,9
O9	1269,0	1285,9	13,959	1,1	T9	655,0	666,8	6,550	1,0
O10	545,0	544,1	10,355	1,9	T10	1304,0	1317,1	14,344	1,1
O11	476,0	481,7	6,188	1,3	T11	880,0	877,5	10,560	1,2
O12	583,0	582,8	8,162	1,4	T12	1327,0	1350,8	25,213	1,9
O13	730,0	726,9	2,920	0,4	T13	2645,0	2680,0	31,740	1,2
O14	518,0	524,1	3,108	0,6	T14	1208,0	1204,8	6,040	0,5
O15	601,0	602,8	16,828	2,8	T15	1224,0	1216,4	24,480	2,0
O16	743,0	760,7	25,262	3,4	T16	1316,0	1350,5	47,376	3,6
O17	727,0	743,7	14,540	2,0	T17	1058,0	1067,6	15,870	1,5
O18	771,0	788,0	18,504	2,4	T18	667,0	673,9	8,004	1,2
O19	443,0	443,9	3,544	0,8	T19	1232,0	1231,6	3,696	0,3
O20	915,0	937,9	8,235	0,9	T20	1741,0	1739,7	12,187	0,7
O21	776,0	779,5	13,192	1,7	T21	645,0	642,0	1,935	0,3
O22	2138,0	2141,0	42,760	2,0	T22	654,0	651,9	18,966	2,9
O23	390,0	397,0	15,600	4,0	T23	2683,0	2736,4	40,245	1,5
O24	651,0	647,0	5,859	0,9	T24	765,0	779,6	9,180	1,2
O25	683,0	698,7	9,562	1,4	T25	924,0	932,7	5,544	0,6
O26	651,0	666,9	3,906	0,6	T26	1194,0	1195,2	4,776	0,4

Příloha č. 5: Tabulka s vyhodnocením stanovení mědi v extraktu totálního rozkladu [mg.kg⁻¹]

Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]	Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]
O1	23,3	23,3	0,233	1,0	T1	49,4	50,2	0,445	0,9
O2	23,1	23,2	0,208	0,9	T2	72,1	73,9	0,649	0,9
O3	11,4	11,5	0,103	0,9	T3	51,7	52,0	0,465	0,9
O4	14,2	14,2	0,156	1,1	T4	15,1	15,1	1,767	11,7
O5	21,4	21,6	0,150	0,7	T5	18,9	19,1	0,038	0,2
O6	31,6	31,9	0,158	0,5	T6	14,5	14,8	0,131	0,9
O7	28,2	28,4	0,141	0,5	T7	12,4	12,5	0,136	1,1
O8	51,1	51,3	0,256	0,5	T8	25,9	26,6	0,518	2,0
O9	28,6	29,3	0,200	0,7	T9	13,9	14,2	0,097	0,7
O10	12,9	13,1	0,168	1,3	T10	23,4	23,8	0,117	0,5
O11	13,2	13,2	0,132	1,0	T11	10,6	10,6	0,307	2,9
O12	12,8	12,9	0,115	0,9	T12	25,8	26,4	0,361	1,4
O13	16,5	16,7	0,132	0,8	T13	94,0	93,9	8,648	9,2
O14	26,3	26,6	0,184	0,7	T14	52,1	51,9	4,012	7,7
O15	26,7	27,1	0,134	0,5	T15	20,5	21,0	0,267	1,3
O16	31,3	32,0	0,563	1,8	T16	32,8	33,2	0,492	1,5
O17	17,2	17,2	0,189	1,1	T17	33,8	34,0	0,507	1,5
O18	18,9	19,3	0,132	0,7	T18	25,9	26,2	1,943	7,5
O19	16,1	16,1	0,113	0,7	T19	46,6	46,4	1,212	2,6
O20	44,9	45,9	0,539	1,2	T20	23,7	23,9	0,616	2,6
O21	30,4	31,2	0,486	1,6	T21	13,4	13,6	0,080	0,6
O22	29,7	29,7	0,208	0,7	T22	23,9	24,0	0,311	1,3
O23	21,8	22,2	0,240	1,1	T23	14,6	14,7	2,088	14,3
O24	20,6	20,6	0,144	0,7	T24	30,6	30,8	1,683	5,5
O25	31,6	31,6	0,253	0,8	T25	24,5	24,8	1,250	5,1
O26	10,9	10,9	0,131	1,2	T26	22,0	22,2	2,574	11,7

Příloha č. 6: Tabulka s vyhodnocením stanovení niklu v extraktu totálního rozkladu [mg.kg⁻¹]

Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]	Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]
O1	18,7	18,7	0,019	0,1	T1	14,7	15,0	0,044	0,3
O2	15,0	15,3	0,075	0,5	T2	25,7	26,3	0,077	0,3
O3	14,2	14,5	0,170	1,2	T3	17,4	17,7	0,278	1,6
O4	11,8	11,8	0,130	1,1	T4	4,6	4,6	0,046	1,0
O5	20,8	20,7	0,146	0,7	T5	7,0	7,0	0,007	0,1
O6	19,8	20,2	0,337	1,7	T6	12,3	12,6	0,098	0,8
O7	17,6	18,0	0,264	1,5	T7	2,4	2,5	0,012	0,5
O8	18,8	19,1	0,038	0,2	T8	<LOD	<LOD	-	-
O9	18,7	18,9	0,468	2,5	T9	7,4	7,5	0,089	1,2
O10	11,8	11,8	0,118	1,0	T10	3,4	3,5	0,082	2,4
O11	10,5	10,6	0,158	1,5	T11	<LOD	<LOD	-	-
O12	11,2	11,3	0,134	1,2	T12	15,5	15,9	0,186	1,2
O13	12,6	12,5	0,063	0,5	T13	15,6	15,7	0,421	2,7
O14	19,1	19,3	0,267	1,4	T14	4,7	4,8	0,183	3,9
O15	19,6	20,0	0,235	1,2	T15	8,7	8,7	0,113	1,3
O16	18,1	18,2	0,018	0,1	T16	20,9	21,4	0,564	2,7
O17	14,2	14,1	0,142	1,0	T17	13,7	13,7	0,151	1,1
O18	13,0	13,1	0,091	0,7	T18	4,9	5,0	0,142	2,9
O19	12,1	12,3	0,073	0,6	T19	5,0	5,0	0,185	3,7
O20	13,1	13,1	0,066	0,5	T20	4,9	5,0	0,123	2,5
O21	18,8	19,1	0,132	0,7	T21	<LOD	<LOD	-	-
O22	13,4	13,3	0,094	0,7	T22	3,2	3,2	0,042	1,3
O23	20,9	21,3	0,209	1,0	T23	<LOD	<LOD	-	-
O24	15,2	15,4	0,274	1,8	T24	15,5	15,4	0,698	4,5
O25	16,1	16,2	0,515	3,2	T25	8,6	8,6	0,267	3,1
O26	9,4	9,6	0,141	1,5	T26	<LOD	<LOD	-	-

Příloha č. 7: Tabulka s vyhodnocením stanovení olova v extraktu totálního rozkladu [mg.kg⁻¹]

Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]	Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]
O1	52,2	53,3	0,574	1,1	T1	162,0	162,6	1,458	0,9
O2	55,0	56,4	0,825	1,5	T2	265,0	269,8	3,445	1,3
O3	17,0	17,4	0,221	1,3	T3	71,2	71,1	0,997	1,4
O4	33,0	33,0	0,231	0,7	T4	73,0	74,3	0,876	1,2
O5	39,3	39,6	0,275	0,7	T5	63,6	64,6	1,463	2,3
O6	32,0	32,5	0,960	3,0	T6	22,2	22,8	0,044	0,2
O7	25,4	25,3	0,203	0,8	T7	53,4	54,5	0,320	0,6
O8	63,2	64,1	0,632	1,0	T8	35,6	36,2	0,783	2,2
O9	40,8	41,9	0,571	1,4	T9	59,8	59,7	1,136	1,9
O10	20,4	20,9	0,816	4,0	T10	58,2	58,5	1,106	1,9
O11	18,4	18,3	0,166	0,9	T11	71,9	72,2	2,157	3,0
O12	13,1	13,1	0,301	2,3	T12	57,5	57,5	0,805	1,4
O13	21,9	22,3	0,307	1,4	T13	169,0	167,9	12,675	7,5
O14	22,8	23,3	0,342	1,5	T14	154,0	156,2	15,092	9,8
O15	36,1	36,7	0,505	1,4	T15	57,4	57,4	0,918	1,6
O16	38,5	38,4	0,655	1,7	T16	102,3	102,3	2,967	2,9
O17	21,9	22,1	0,482	2,2	T17	105,1	105,6	2,207	2,1
O18	23,1	23,2	0,832	3,6	T18	64,5	64,3	2,258	3,5
O19	19,8	20,0	0,614	3,1	T19	77,9	79,6	1,714	2,2
O20	36,0	36,0	0,684	1,9	T20	87,3	87,2	3,929	4,5
O21	35,1	35,5	0,842	2,4	T21	56,9	57,0	0,057	0,1
O22	98,8	100,2	1,976	2,0	T22	47,9	47,8	1,916	4,0
O23	13,3	13,5	0,200	1,5	T23	85,4	85,9	4,014	4,7
O24	56,1	56,3	1,010	1,8	T24	35,9	36,6	1,257	3,5
O25	33,8	34,0	0,304	0,9	T25	143,0	143,7	6,864	4,8
O26	20,2	20,2	0,182	0,9	T26	47,8	47,5	9,417	19,7

Příloha č. 8: Tabulka s vyhodnocením stanovení zinku v extraktu totálního rozkladu [mg.kg⁻¹]

Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]	Vzorek	Průměr	Medián	Smdoch	RSD [%]
O1	87,2	87,5	2,180	2,5	T1	254,0	260,1	5,588	2,2
O2	161,0	162,0	2,415	1,5	T2	329,0	336,6	3,948	1,2
O3	73,2	72,8	0,439	0,6	T3	254,0	258,8	2,286	0,9
O4	71,1	72,1	0,427	0,6	T4	141,0	140,4	1,269	0,9
O5	148,0	149,8	4,736	3,2	T5	125,0	124,2	2,250	1,8
O6	117,0	118,9	1,989	1,7	T6	120,0	120,0	0,360	0,3
O7	106,0	105,7	0,318	0,3	T7	84,7	86,1	1,863	2,2
O8	282,0	285,5	2,256	0,8	T8	188,0	192,5	4,136	2,2
O9	131,0	132,1	1,834	1,4	T9	92,1	93,0	0,276	0,3
O10	57,3	58,6	1,031	1,8	T10	151,0	154,1	1,963	1,3
O11	53,7	54,1	0,537	1,0	T11	126,0	128,6	1,134	0,9
O12	46,8	47,7	2,106	4,5	T12	138,0	140,8	2,070	1,5
O13	87,5	89,5	0,700	0,8	T13	484,0	485,4	5,324	1,1
O14	98,8	98,7	0,692	0,7	T14	278,0	284,4	6,672	2,4
O15	97,1	96,6	0,680	0,7	T15	130,0	133,0	2,340	1,8
O16	152,0	154,5	2,128	1,4	T16	149,0	148,2	2,384	1,6
O17	94,3	96,0	0,943	1,0	T17	163,0	165,1	2,771	1,7
O18	123,0	126,1	3,075	2,5	T18	101,0	103,1	1,414	1,4
O19	51,1	51,5	0,613	1,2	T19	159,0	163,2	2,385	1,5
O20	127,0	129,7	1,016	0,8	T20	260,0	260,9	1,820	0,7
O21	212,0	215,4	6,996	3,3	T21	136,0	137,3	1,768	1,3
O22	198,0	200,5	4,158	2,1	T22	82,0	83,8	0,246	0,3
O23	50,0	51,2	0,300	0,6	T23	130,0	130,4	0,910	0,7
O24	168,0	168,9	4,032	2,4	T24	122,0	123,0	0,244	0,2
O25	80,8	82,8	0,808	1,0	T25	145,0	144,6	1,305	0,9
O26	52,2	53,5	1,409	2,7	T26	168,0	170,1	1,680	1,0