



PŘÍRODOVĚDECKÁ
FAKULTA
Univerzita Karlova

Posudek doktorské disertační práce

Mgr. Gabriely Kučerové

s názvem

Charakterizace chirálních a achirálních chromatografických separačních systémů

vypracované na Katedře fyzikální a makromolekulární chemie Přírodovědecké fakulty
Univerzity Karlovy v Praze

Předkládaná disertační práce je věnována charakterizaci separačních systémů v HPLC a SFC a je kompilací 5 článků publikovaných v recenzovaných zahraničních časopisech v rozsahu let 2013 až 2017:

- *Separation and Purification Technology*, IF 3,927
- 2 x *Chromatographia*, IF 1,401
- *Journal of Chromatography A*, IF 3,716
- *Chirality*, IF 1,833

Skutečnost, že uvedené články prošly řádným recenzním řízením v těchto časopisech, dokazuje kvalitu a schopnost samostatné vědecké práce a publikační aktivity studentky.

Práce o rozsahu 50 stran (plus příslušné články) je opatřena společným textem rozděleným na příslušné kapitoly, které čtenáře stručně seznamují s řešenou problematikou. V kapitole výsledky jsou shrnuty výsledky jednotlivých článků a v závěru práce jsou tyto ještě stručně zopakovány. Z hlediska struktury a rozsahu tedy práce plně vyhovuje požadavkům na disertační práci. U předkládaných článků není přiložen Supplementary material, což je škoda, protože to snižuje čtivost práce.



Dotazy a komentáře

V posudku se zaměřím na tento společný text a doplňující dotazy k předloženým článkům.

1. Na straně 8 v seznamu použitých zkratk a na straně 20 v kapitole o LFER je pro koeficient c v LFER rovnici použit výraz „průsečík“. Není správným výrazem spíše „úsek“, tak jako u běžné lineární regresní rovnice? Tvrzení, že tento koeficient nereflektuje žádnou interakci není zcela jednoznačné, protože v sobě zahrnuje zbytkovou hodnotu $\log k$, kterou nelze zahrnout do žádného ze součinů použitých koeficientů a představuje tedy zbytkovou nejistotu použitého přístupu. Čím je koeficient menší, tím lépe rovnice charakterizuje testovaný systém.
2. V kapitole 4. Chirální stacionární fáze jsou pod hlavičkou makrocyclických antibiotik (4.2) uváděny jak cyklodextrinové (4.2.1), tak i polysacharidové (4.2.2) chirální selektory. Jde o správné zařazení těchto selektorů, nebo o chybu číslování kapitol? Vůbec však nejsou zmiňovány chirální selektory calixarenového typu.
3. Na straně 20 je správně uvedeno, že SBE- β -CD nese záporný náboj, zatímco na str 29 je uveden náboj kladný. Je k tomu nějaký důvod, nebo jde o chybu v textu?
4. Byl v publikaci II nějakým způsobem zkoumán stupeň pokrytí SF?
5. V publikaci III je uvedeno, že pokrytí SF SBE- β -CD bylo určeno gravimetricky. Jakým způsobem a s jakou přesností byl tento parametr změřen?
Nebyly zjištěny problémy s precipitací SBE- β -CD vzhledem k jeho relativně vysoké koncentraci, 0,5 a 1 mg/ml, v MF?
6. Je něco známo o vlivu koncentrace benzoátu v MF na retenci a chirální separaci v publikaci IV? Nebylo by vhodnější místo stejné iontové síly použitých MF použít stejné molární koncentrace octanu a benzoátu?

Předkládaná práce má nespornou vědeckou hodnotu a velmi se mi líbí. Uvedené komentáře a dotazy nejsou takového charakteru, aby snížily nebo zpochybnilly celkovou kvalitu předkládané práce, a proto ji plně doporučuji k přijetí.

Praha, 23. 8. 2018

doc. RNDr. Radomír Čabala, Ph.D.