

Oponentský posudek

Bakalář: **Michal Kalus**

Studijní program/obor: Medicinální chemie

Bakalářská práce: **Peak shape distortions in capillary electrophoresis**

Bakalářská práce Michala Kaluse je zaměřena na vliv elektromigrační disperze a Taylorovy disperze na výsledný tvar píků v kapilární elektroforéze. Práce je rozdělena na dvě části. V první části je studována komigrace dvou analytů o podobných mobilitách. Experimentální výsledky jsou porovnány se simulovanými daty a matematickým modelem, který byl navržen ve skupině Dr. Dubského. Byla prokázána velmi dobrá shoda teoretických předpovědí a experimentálních dat. V druhé části se autor zabývá vlivem Taylorovy disperze na tvar píků. Na základě experimentálních dat protlačování zóny DMSO kapilárou v kombinaci s vhodným teoretickým modelem je určen difúzní koeficient DMSO. Současně autor analyzoval výsledky numerických simulací k určení vlivu Taylorovy disperze na tvar migrujících píků.

K práci mám několik faktických poznámek a dotazů:

1. Stránky 31 a 32 jsou v tištěné verzi práce prohozeny.
2. Hodnoty změřených či vypočtených veličin jsou uvedeny na příliš mnoho platných číslic. Chyba stanovení není správně zohledněna.
3. Na straně 27 autor uvádí, že rozdíly v času elektroosmotického toku jsou zanedbatelné. Ale hned v následujícím řádku uvádí postup provedené korekce. Ráda bych se autora zeptala na postup odvození vztahu použitého ke korekci (vztah 30) a na vliv této korekce na pozici analytu a následnou analýzu studovaných profilů. Čas EOF byl odečten s přesností 0.0001 min. Je tato přesnost relevantní? Jak byl takto přesný čas EOF stanoven?
4. Byla zohledněna frekvence detektoru během analýzy dat? Frekvence detektoru hraje při srovnání tvaru píků zásadní roli a musí být v textu uvedena. Jaký vliv by měla nízká frekvence detektoru na tvar píků?
5. V legendě obrázku 5, panel C, je otočeno pořadí vlnových délek, stejně jako barvy pro jednotlivé vlnové délky. Toto zásadně komplikuje pochopení obrázku. Je legenda panelu C takto v pořádku?
6. Popis osy x Obrázku 8 a Obrázku 9 nekoreluje. Předpokládám, že čas u Obrázku 8 je uveden v minutách, nikoliv v sekundách.
7. Jakým způsobem byla převedena variance z časové domény, viz Obrázek 8, do prostorové domény (Obrázek 9). Jaký vliv má pomalá rychlost průchodu píku detektorem na výslednou pološifku píku v čase vs prostoru. Je třeba tento vliv nějak korigovat?
8. V seznamu symbolů chybí symboly l_{det} , l_{tot} a r . Současně v rámci rovnic 34 – 39 je několikrát zaměněn symbol l_{tot} za L .
9. Rovnice 37 a 39 jsou uvedeny chybně.
10. Na straně 34 autor uvádí, že stanovená hodnota difúzního koeficientu pro DMSO a hodnoty publikované v literatuře se významně liší. V závěru však autor uvádí, že jsou tyto hodnoty v dobré shodě. Tato chyba by měla být v práci opravena, a proto vyžadují opravný listek. Současně bych se ráda zeptala, jak si autor vysvětluje rozdíl mezi publikovanou a naměřenou hodnotou difúzního koeficientu.

Uvedené připomínky nemají snižovat kvalitu předkládané bakalářské práce. Bakalářskou práci Michala Kaluse i přes uvedené chyby hodnotím kladně a doporučuji ji k obhajobě s hodnocením velmi dobře.

V Praze dne 14.9.2018

Jana Šteřlová