

## Posudek oponenta diplomové práce

<b>Univerzita Karlova</b>	
<b>Fakulta</b>	Přírodovědecká fakulta
<b>Studijní program</b>	Analytická chemie
<b>Student</b>	Bc. Kateřina Bártová
<b>Diplomová práce (název)</b>	Interakce triazolu terkonazolu s kationty mědi Interaction of triazole terconazole with copper cations
<b>Oponent</b>	prof. Ing. Tomáš Navrátil, PhD.
<b>Školitel</b>	doc. RNDr. PhDr. Ing. Jana Jaklová Dytrtová, Ph.D.
<b>Konzultant</b>	prof. RNDr. Helena Ryšlavá, CSc.
<b>Pracoviště oponenta</b>	Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

Předkládaná diplomová práce je psána v jazyce českém a je členěna v souladu požadavky na kvalifikační práci tohoto typu (Abstrakt, Cíle práce, Hypotézy, Teoretický úvod, Experimentální část, Materiál a metody, Výsledky a diskuse, Závěr, Použitá literatura).

Předkládaná práce je věnována studiu terkonazolu, který se řadí mezi triazoly s fungicidním účinkem a užívá se k lokální léčbě vaginálních infekcí. Podnětem ke zkoumání vlastností této sloučeniny je skutečnost, že u žen, které mají zavedený typ nitroděložního tělíška, jehož mechanismus účinku spočívá v uvolňování iontů mědi, by mohlo ve vaginální oblasti docházet k interakci terkonazolu s ionty mědi. Příbuzné triazoly mění v komplexech s měďnatými a měďnými ionty své vlastnosti, např. toxicitu či mobilitu. Navíc možná iniciace tzv. Fentonovy reakce by mohla vést k cyklické produkci volných radikálů. Ke studiu stechiometrie, fragmentace a stability komplexů terkonazolu s ionty  $\text{Cu}^{2+}$  a  $\text{Cu}^+$  byla použita tandemová hmotnostní spektrometrie.

### Komentáře, náměty, připomínky:

- Obr. 6, 8, 10, 12, 13, 14, 21, 22, tab. 1, 2: Skutečně probíhalo měření v roztoku v  $\text{CH}_3\text{COH}/\text{H}_2\text{O}$  (1:1)?
- Str. 1: Vědecká hodnota konzultantky má být „CSc.“ nikoliv „Csc.“
- Experimentální část měla být očíslována jako „3.“. Odstavec „Materiál a metody“ nemusel být uveden vůbec.

### Dotazy k obhajobě

- Proč byl použit jako zdroj měďnatých iontů  $\text{CuCl}_2$  a ne těkavější měďnatá sůl, např. mravenčan měďnatý? Jak by se mohla změnit MS spektra terkonazolu s mravenčanem měďnatým místo chloridu?
- Podle literatury se vaginální pH pohybuje v rozpětí mezi 3,8 a 4,5. Systém byl autorkou měřen při pH 4,0 až 7,2. Proč tedy bylo zvoleno studované rozmezí pH (tedy za podmínky, že pH z kapalně fáze zůstane zachováno i v MS)?
- Měření probíhala za přítomnosti ethanolu (voda, ethanol) v poměru 1:1. Přítomný alkohol bude mít zcela určitě vliv na tvorbu solvatačních obalů, vznik, stabilitu a rovnováhu vytvářených komplexů atd. Uvítal bych tedy změření závislosti na množství přítomného ethanolu.
- Má autorka nějakou představu o principu a průběhu možné Fentonovy reakce při předpokládané aplikaci terkonazolu (v souladu s poslední větou ve 2. odst. Závěru).
- Jakými jinými analytickými metodami by bylo možné sledovat vznik komplexů terkonazolu s ionty mědi, případně jejich stabilitu?

## Shrnutí:

Oceňuji objem vykonané práce. Práce shrnuje výsledky poměrně značného experimentálního úsilí, je srozumitelně a přehledně sepsána. Její členění je odpovídající. Použité přístupy řešení problémů jsou odpovídající a nelze principiálně nic namítat ani proti interpretaci výsledků.

Důkladná literární rešerše poskytla autorce dobré východisko pro následné experimenty (96 citací). Dle mého názoru, veškerá použitá literatura byla řádně citována. Domnívám se, že cíl práce byl splněn a metodický přístup k řešení považuji za odpovídající.

Všechny uváděné poznámky a komentáře je možno považovat spíše za formální, doplňující a mají sloužit autorce k podpoře dalších vědeckých postupů. Nenalezl jsem žádnou závažnou chybu, která by bránila úspěšnému přijetí této diplomové práce.

Podle mého názoru, založeném na předložené diplomové práci Bc. Kateřiny Bártové, jmenovaná prokázala, že je schopna samostatné práce, prokázala dostatečné tvůrčí schopnosti v dané oblasti výzkumu a jsem přesvědčen, že její práce splňuje požadavky kladené na diplomovou práci v daném oboru. Tím podle mého splnila všechny předpoklady pro úspěšné přijetí této diplomové práce, a proto práci k obhajobě

***doporučuji.***

Stanovisko k opravě chyb v práci:

opravný lístek/oprava v textu **NENÍ** (zakroužkujte) podmínkou přijetí práce

## Celkový návrh

Práci doporučuji k přijetí k dalšímu řízení: **ANO**

Navrhovaná celková klasifikace: **vyborně**



.....

prof. Ing. Tomáš Navrátil. Ph.D.

Ústav fyzikální chemie J. Heyrovského AV ČR, v.v.i.

V Praze 1. 9. 2022