

Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc., Ústav analytickej chémie, Fakulta chemickej a potravinárskej technológie, Slovenská technická univerzita v Bratislave

Oponentský posudok na habilitačnú prácu

RNDr. Romany Sokolovej, PhD.

Význam in situ UV-Vis a IČ spektroeletrochemie při určení redoxního mechanismu bioaktivních látek

Predložená habilitačná práca predstavuje súborný vedecký spis, ktorý sa zaoberá pomerne komplikovanými oxidačnými a redukčnými mechanizmami biologicky aktívnych, prevažne organických, látok s početnými odkazmi na prílohy publikované práce P1–P18, kde má autorka v poradí autorov prvé alebo popredné miesto. Ide o významné biologicky látky širokého záujmu ako sú flavonoidy, hydroxychinolíny, 1,10-fenantrolíny či viacjadrové koordinačné zlúčeniny medi ako modely funkcií príslušných enzýmov. Metodicky sa práca zameriava na využitie elektrochemických princípov skúmania v kombinácii s UV-Vis a IČ spektrometriou technikami spektroeletrochémie.

Výber študovaných látok a adekvátnych experimentálnych techník je hlavnou prednosťou habilitačnej práce. Z tohto pohľadu je práca vysoko aktuálna. Výsledky práce sú významným prínosom pre odbor fyzikálnochemických metód skúmania ako aj pre charakterizáciu redoxných premien vybraných bioaktívnych látok.

Výsledky boli publikované v popredných časopisoch odboru, čo vyjadruje ich kvalitu a uľahčuje prácu oponenta. Objasnenie redoxných mechanizmov sledovaných bioaktívnych látok má príslušný vedecký ohlas dokumentovaný významným počtom citácií. Práca naznačuje aj ďalší vývoj kombinácie techník spočívajúci napríklad v zdokonalení spojenia elektrochémie s fluorescenčnou spektrometriou.

Originalitu habilitačnej práce potvrdzuje kontrola v systéme Turnitin, ktorým sa nezistili žiadne významné známky plagiátorstva. Uvádza minimálny prekryv s vlastnými, v habilitácii citovanými, publikáciami a všeobecnými publikovanými poznatkami.

Otázky

s. 18: “aktívni místo molekuly chráneno uvnitř kavity CD” – Oponenta by zaujímalo nakoľko všeobecne toto platí, keďže v prípade CD sú známe interakcie keď molekula nie je vsunutá v kavite.

V časti 2.3 sa uvádzajú experimentálne úskalnia spájania techník v prípade spektroeletrochémie spolu s použitými možnosťami a spôsobmi ich riešenia. Nebolo by zaujímavé a užitočné venovať týmto metodickým aspektom v dizertácii väčšiu pozornosť, je to spracované inde?

s. 21, obr. 3: Chýba identifikácia častí obrázku A, B, C, je možné ju pri obhajobe doplniť a vysvetliť?

Je možná či známa korelácia štruktúry a zistených redoxných mechanizmov bioflavonoidov s ich biochemickou, konkrétne antioxidačnou aktivitou? Prehľadové spracovanie tohto aspektu

by zasluhovalo samostatnú pozornosť nakoľko by poukázalo na praktickú stránku inak podrobne vykonaného štúdia.

s. 33, obr. 4: Aký je dôvod použitia hranatej zátvorky pre štruktúru anionradikálu a nepoužitia jej v prípade radikálu či aniónu?

s. 35: Pomerne stručná časť 3.4 o charakteristike komplexov medi je mimoriadne zaujímavá z pohľadu katalýzy oxidačnej reakcie organického substrátu (DTBC). V akom fyzikálnom zmysle treba vidieť túto katalýzu, ide o katalyzovanú chemickú reakciu oxidácie organickej molekuly kyslíkom so zapojením atómu kyslíka mednatého komplexu (schémy v P18) alebo môže ísť o zapojenie vzdušného kyslíka či elektrokatalýzu ovplyvňujúcu redoxnú premenu organickej látky?

s. 35: „u atómu meďi z oxidovaného stavu 2+ na oxidovaný stav 1+...“. - Je pojem oxidovaný stav v tejto súvislosti obvyklý v porovnaní s pojmi oxidáčny stupeň či oxidáčné číslo?

s. 36: „jednojaderný komplex meďi není pro katalýzu kvůli interferenci rostoucího absorpčního pásu při 475 nm během redukce vhodný.“ – Ako súvisí jav katalýzy s uvedenou interferenciou? Možno ide len o nie práve šťastnú slovnú formuláciu.

Formálne chyby

s. 19 – měření roztoku, s. 20, obr. 2 - měření IČ či UV-Vis spektroechemie, s. 22 – obrázek měřený autorkou – z hľadiska metrologie (viď Medzinárodný metrologický slovník, VIM 2012) je možné merať len veličinu, teda nie roztok/látku/analyt ani metódu.

s. 35: V nadpise 3.4 použitý výraz umelý enzým by snád' bolo vhodnejšie uvádzať s úvodzovkami ako „umelý“ enzým.

Záver

Vyššie uvedené pripomienky a otázky smerujú k diskusii o možnej prezentácii a interpretácii výsledkov a nijako neznižujú kvalitu dizertačnej práce. Konštatujem, že habilitačná práca RNDr. Romany Sokolovej, PhD. jednoznačne dokumentuje zvládnutie metodiky vedeckej práce, jej schopnosť samostatne tvorivo a vedecky pracovať a získať relevantné pôvodné vedecké výsledky. Predloženú prácu preto odporúčam ako podklad k obhajobe a po jej úspešnom obhájení v zmysle platných predpisov súhlasím s udelením RNDr. Romane Sokolovej, PhD. vedecko-pedagogického titulu „docent“.

V Bratislave 4. februára 2023

Prof. Ing. Ján Labuda, DrSc.