MASARYKOVA UNIVERZITA
Přírodovědecká fakulta
Ústav chemie
625 00 Brno, Kamenice 5
tel. +420-549497754
libuse@chemi.muni.cz
https://www.sci.muni.cz/labifel/

Oponentský posudek na habilitační práci

Autor: ***RNDr. Romana Sokolová, PhD.***
Název: **Význam *in situ* UV-Vis a IČ spektroelektrochemie při určení redoxního mechanismu bioaktivních látek**
Oponent: *Prof. RNDr. Libuše Trnková, CSc.*

Habilitační práce (HP) Dr. Romany Sokolové představuje rozsáhlou studii oxidačně-redukčních mechanismů významných bioaktivních substancí, které mají úzký vztah k medicíně, farmacii a k životnímu prostředí (léčiva, antioxidanty, drogy, toxické látky, barviva). Procesy s přenosem elektronů, spřažené s méně či více komplikovanými chemickými reakcemi, byly sledovány pomocí elektrochemických a spektroelektro-chemických metod. S využitím UV-Vis a IČ spekter zaznamenávaných *in situ,* tedy během elektrodového děje, bylo možné určit vznikající reakční meziprodukty a finální produkty, a tudíž popsat reakční mechanismy zkoumaných látek, třeba i za různých experimentálních podmínek. Doplňujícím a zároveň podpůrným materiálem se v některých případech stala také kvantová chemie s výpočty HOMO a LUMO energií, které korelovaly s hodnotami oxidačních a redukčních potenciálů vybraných flavonoidů popř. fenantrolinů.
Habilitační spis prezentuje výsledky osmnácti vybraných prací publikovaných ve významných impaktovaných časopisech (ΣIF=74,96) jednak prostřednictvím souhrnného komentáře a jednak prostřednictvím jejich přiložených verzí. Celý spis obsahuje skoro 200 stran a 85 relevantních citací.

Význam dosažených výsledků a jejich vědecký přínos pro rozvoj vědního oboru

Chemická struktura látek úzce souvisí s jejich reaktivitou a v biologickém prostředí s jejich funkcí. Pro pochopení tohoto úzkého vztahu je třeba se zabývat kromě chemických reakcí a procesů přenosu elektronů také různými efekty, které do těchto dvou kategorií vstupují. Znalost redukčních a oxidačních procesů zkoumaných látek, např. léčiv na přírodní a syntetické bázi může významně přispět k pochopení mechanismu jejich účinku. Je velice důležité odhalit metabolity, které mohou mít oproti prekurzoru odlišnou bioaktivitou nebo dokonce mohou být organismu škodlivé. V tomto pohledu HP je velkým přínosem nejen pro rozvoj elektrochemického a bioelektrochemického oboru, ale i pro lékařství a farmacii. Velmi přesvědčivým příkladem je zjištěná korelace mezi hodnotami redoxních potenciálů zkoumaných flavonoidů a jejich antioxidační účinností. Vědecké poznatky shrnuté v HP považuji za významné a užitečné pro širší výzkum zacílený na pochopení procesů spojených s přenosem nábojů doprovázených přenosem protonů, tedy procesů na molekulární úrovni.

Dosažené výsledky a nové poznatky HP

Dosažené výsledky dr. Romany Sokolové mají obrovský potenciál, který poskytuje nové informace o mechanismu elektrodových procesů velkého množství bioaktivních látek přispívající k objasnění kontraverzních údajů o jejich redoxních procesech uvedených v literatuře. HP ukazuje využití fundamentálních elektrochemických principů a shrnuje zásadní aspekty při řešení komplexních oxidačních i redukčních mechanismů elektro-aktivních látek biologického významu. Nové poznatky získané kombinací běžných elektrochemických metod, absorpčních spekter a kvantové chemie jsou návodem pro určení reakčního schématu, přítomnosti spřažených dějů, vzniku nestálých meziproduktů a pro zjištění chemické reverzibility procesů.

Chvályhodný vědecko-výzkumný potenciál autorka HP věnovala exaktnímu vyhodnocení spektroelektrochemických dat v kontextu experimentálních parametrů, včetně efektu vody a komplexujících agens. I když je obsah HP zacílen na vybraný počet velmi kvalitních publikací, vědecký profil Dr. Romany Sokolové reprezentován WOS v sobě zahrnuje skoro devadesátku publikací s citacemi přesahující bez autocitací počet jednoho tisíce a h - indexem rovným 22. Zhruba u jedné třetiny publikovaných článků, věnovaných především oxidačním procesům flavonolů, flavolignanů, hydroxychinolinových derivátů bez azo a s azo skupinou a fenantrolinových derivátů, je paní doktorka korespondujícím autorem.

Přínos pro rozvoj vědy a techniky

Řešení redukčních a oxidačních mechanismů organických látek ve vodném i nevodném prostředí vyžaduje komplexní přístup založený na znalosti chemických i elektrochemických principů a jejich aplikací v experimentu. Tento přístup autorka HP se svými studenty umí realizovat a její práce jsou přínosem pro další rozvoj vědy a výzkumu. Přínos lze vidět v několika rovinách: (a) jak využít, aplikovat a správně analyzovat spektrální experiment *in situ* použitý v běžných elektrochemických technikách; (b) jak interpretovat nestabilní reakční meziprodukty, které by mohly být základními kameny v biostransformacích; (c) jak se postavit k reakčním mechanismům z hlediska prostředí a jeho složení, včetně přítomnosti koplexující látky a (d) jak nabídnout a rozvíjet spektroelektrochemické studie též pro studium biochemických přeměn, kde dochází k přenosu elektronu a protonu.

Připomínky a dotazy

Přesto, že všechny uvedené publikace v HP spisu prošly řádným recenzním řízením, moje zvědavost i zvídavost mi nedá, abych se nezeptala a nezískala tak názor odborníka v této oblasti výzkumu:

1) V kinetických a mechanistických studiích se v souvislosti s fenoly diskutuje koncertní mechanismus přenosu proton-elektron (Concerted Proton-Electron Transfer – CPET nebo Proton Coupled Electron Transfer – PCET) s mechanismem odštěpení atomu vodíku (HAT), jaká je Vaše zkušenost získaná při studiu oxidačních procesů flavonoidů?
2) Efekt vody je v redoxním mechanismu Vámi studovaných bioaktivních látek klíčový, u kterých byl tento efekt největší?
3) Elektrodová kinetika hodnocená s přístupem J.-M. Savéanta a E. Lavirona spočívá především na kritériích, která platí pro neadsorbovanou a adsorbovanou elektroaktivní

částici. Předpokládám, že mechanistické studium se kloní spíše k prvnímu jmenovanému přístupu, ale vyskytl se i případ, kdy Vám adsorpce pomohla rozřešit sporný problém?

4) Máte poměrně velkou zahraniční spolupráci, o tom svědčí i publikace se zahraniční účastí. Které zahraniční pracoviště Vám ve Vaší práci nejvíce pomohlo?
5) Kterého výsledku nebo výsledků ve své dosavadní vědecké práci si nejvíce ceníte a proč?

Zvídavost nás formuje k lepší dokonalosti, zvědavost nám dává podnět, do jaké oblasti svoji zvídavost nasměrujeme. Pod vlivem této myšlenky je HP sepsána; snahou autorky je výstupy svého vědeckého bádání co nejlépe předat a myšlenky v nich obsažené co nejlépe vysvětlit. HP je cenným materiálem použitelným pro další výzkum v oblasti redoxních procesů ekologicky, lékařsky a biologicky významných látek s ohledem na kinetiku a mechanismus jejich elektrodových procesů, popř. jejich transformací. Výstupy spektroelektrochemických studií mohou být nápomocné k objasnění reálného dopadu na ŽP a na zdraví člověka.

Na základě kladného hodnocení HP a na základě zapojení Dr. Romany Sokolové do pedagogického procesu na třech univerzitách českých a jedné univerzitě v cizině, doporučuji habilitační komisi i Vědecké radě PřF UK přijmout habilitační práci RNDr. Romany Sokolové Ph.D. jako podklad pro řízení jejího jmenování docentem v oboru fyzikální chemie.

Brno, 10. února 2023 Libuše Trnková