

## Oponentský posudek bakalářské práce

Ludmila Müllerová (Přírodovědecká fakulta UK, Praha):

### Iontové párování vybraných kationtů s micelou v systémech kapilární elektroforézy

Oponent: RNDr. Václav Kašička, CSc., Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha

---

Předkládaná bakalářská práce se zabývá speciálním případem kapilárních elektromigračních dějů, elektromigrací iontů v přítomnosti micel. Na první pohled by se mohlo zdát, že se jedná převážně o teoretickou problematiku základního výzkumu, ale není tomu tak. Elektromigrace v elektrolytových systémech obsahujících micely je totiž základem jednoho z hlavních módů kapilárních elektromigračních metod, micelární elektrokinetické chromatografie (MEKC). Vynález této metody prof. Terabem v r. 1984 představuje významný mezník v historii elektromigračních metod, neboť MEKC umožnila využití těchto metod i pro analýzu neionogenních látek. I přesto, že od tohoto vynálezu uplynulo v letošním roce právě čtvrt století, ukazuje se, že mnohé detaily této metody, stejně jako i dalších módů elektroseparačních technik, zůstávají dosud neodhaleny a stojí za to je dále teoreticky i experimentálně zkoumat. Hlubší poznání zákonitostí těchto metod umožní nejen racionálnější a cílenější volbu experimentálních podmínek těchto metod, ale v konečném efektu i jejich kvalitnější a širší využití v analytické praxi. Téma bakalářské práce je tedy aktuální a vědecky i prakticky významné.

Autorka si stanovila dva dílčí cíle:

1. Sledovat efektivní mobilitu kationtů sodíku, draslíku, cesia a tris(hydroxymethyl)amino-methanu v roztocích s různou koncentrací dodecylsulfátu lithného a změřit závislost mobility na koncentraci dodecylsulfátu.
2. Určit směrnici závislosti efektivní mobility kationtů alkalických kovů na koncentraci dodecylsulfátu při nadmicelárních koncentracích surfaktantu.

Rád konstatuji, že oba tyto cíle byly úspěšně splněny. Výsledky bakalářské práce představují významný příspěvek k rozvoji kapilárních elektromigračních metod a názorně ukazují, že kromě využití pro analytické účely tyto metody představují mocný nástroj i pro fyzikálně chemickou charakterizaci analyzovaných látek a pro studium dějů probíhajících v roztocích. Práce výhodně navazuje na předchozí výsledky pracoviště autorky, na kterém je teorie elektromigrace dlouhodobě studována a jež v této oblasti patří k absolutní světové špičce.

Výsledky přinášejí řadu nových poznatků, mj. z experimentálně zjištěné závislosti efektivních pohyblivostí kationtů na koncentraci detergentu při jeho nadmicelárních koncentracích byly odvozeny parametry, které umožňují kvantitativně porovnávat míru interakce analyzovaných kationtů s micelami. Pozitivním zjištěním je skutečnost, že nalezená zvyšující se míra interakce kationtů s micelami s rostoucím hydrodynamickým poloměrem těchto kationtů je v dobré shodě s dříve publikovanými výsledky dosaženými jinými nezávislými metodami.

Po formální stránce je bakalářská práce sepsána přehledně, pečlivě a v pěkné grafické úpravě, s minimálním počtem překlepů.

Připomínky, dotazy a náměty do diskuse:

1. V práci se vyskytuje několik ne zcela přesných vyjádření, např. první věta v úvodu na str. 8, ve které se uvádí, že: „Elektroforéza jako analytická metoda separační metoda založená na rozdílných migračních vlastnostech látek v elektrickém poli existuje již 200 let.“ není zcela přesná, neboť jako reálná „analytická metoda“ se elektroforéza využívá méně než 100 let. V definici efektivní pohyblivosti na str. 9 by mělo být uvedeno, že efektivní mobilitou se rozumí mobilita látky nejen při daném pH a iontové síle, ale také při dané teplotě. Poněkud vágně je používán termín „původní mobilita“, prosím o bližší vysvětlení.
2. Užití symboly by měly být před prvním použitím v textu vždy vysvětleny, což není splněno např. pro symboly  $U$  (napětí) na str. 8,  $u_{EOF}$  (mobilita elektroosmotického toku) na str. 9 a  $I$  (iontová síla roztoku) na str. 10. V popisu osy  $Y$  na obr. 5 chybí číselný faktor  $10^{-9}$ . Pro nepolární část surfaktantu se v českém názvosloví spíše používá termín „chvost“ než „ocas“.
3. V popisu experimentálních podmínek chybí údaj o teplotě, při které byly CE experimenty prováděny? Byla teplota konstantní? Jak se lišil elektrický proud a příkon v jednotlivých experimentech? Bylo možno zanedbat vzrůst teploty v kapiláře v důsledku Jouleova tepla?
4. Na str. 20 je uvedeno, že proložení trojúhelníkovitých, elektromigrační disperzí deformovaných píků Haarhoffovou – van der Lindeho funkcí umožňovalo přesnější určení jejich polohy. Jak velké relativní změny elektroforetických pohyblivostí toto zpřesnění způsobovalo?
5. Jaké byly relativní standardní odchylky průměrných hodnot efektivních pohyblivostí uváděných v tabulkách 2 a 3.
6. Jaké další vztahy a vstupní data bude třeba zavést do programů PeakMaster a Simul, aby umožňovaly simulovat elektromigrační separace metodou MEKC i v případě iontově-párových interakcí analytů či složek základního elektrolytu s micelami?

Závěr:

Autorka prokázala velmi teoretické znalosti zkoumané problematiky a schopnost jejich tvůrčího praktického využití. Bakalářská práce přináší nové cenné poznatky, ukazuje na možnosti využití kapilárních elektromigračních metod ke studiu interakcí iontů s micelami a lze ji plně doporučit k obhajobě. Navrhovaný klasifikační stupeň: výborně.

V Praze, dne 18.6.2009

RNDr. Václav Kašíčka, CSc.