

Školitelský posudek na bakalářskou práci Ludmily Müllerové „Iontové párování vybraných kationtů s micelou v systémech kapilární elektroforézy“

Naše skupina vyvinula několik simulačních programů, které jsou schopny s velkou přesností předpovědět chování elektromigračních systémů při kapilární elektroforéze. Zvláště jeden z těchto programů, PeakMaster, může sloužit jako optimalizační nástroj, který je schopen pomocí počítače optimalizovat složení separačních systémů, aniž je nutné provádět skutečné „mokrý“ experimenty. PeakMaster tak může ušetřit práci i finanční prostředky nutné pro vývoj nové separační metody. Ve velké většině případů se předpovědi tohoto programu velmi dobře shodují s experimenty (samozřejmě pokud jsou správné výchozí fyzikálně chemické charakteristiky látek). V případě micelárních systémů jsme však vždy pozorovali odchylky v mobilitách systémových píků, a to v systémech s nadkritickou micelární koncentrací. Předpokládáme, že tento problém je způsoben tím, že v roztoku dochází k dalšímu jevu, který dosavadní verze PeakMasteru nepostihuje: k iontovému párování mezi kationty přítomnými v roztoku a micelou, což ovlivňuje efektivní mobility kationtů.

Úkolem Lídy Müllerové bylo provést první experimenty v této oblasti a prozkoumat stupeň iontového párování dodecylsulfátových micel s řadou alkalických kationtů. Výsledky by měly sloužit jako startovací bod pro rozšíření stávajícího modelu elektromigrace v micelárních systémech o interakce typu iontového párování. Uchazečka se musela naučit nejen dobře ovládat přístroj pro kapilární elektroforézu, ale i udělat příslušný literární přehled a rovněž porozumět značné části teorie elektromigrace. Toto zadání splnila beze zbytku. Pracovala velmi samostatně, čistě, experimenty se jí dařily. Navíc má velmi dobré formulační schopnosti, takže byla schopna napsat svou bakalářskou práci velmi dobře a přesně.

Doporučuji přijetí předložené práce Lídy Müllerové jako práce bakalářské.

V Praze, 22. června 2009

Bohuslav Gaš

školitel