

## Posudek oponenta bakalářské práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: **Tereza Schröpferová**

Název práce: **Komplexy železnatých solí a flavonoidů**

**A. Bodové hodnocení jednotlivých aspektů práce (označte právě jednu z možností)**

<b>1. Rozsah BP a její členění</b>	
x	<b>A - přiměřené, odpovídají charakteru BP a významu jednotlivých částí</b>
	B - nevyrovnané, členění není logické n. rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s jejich významem
	C - uspokojivé, rozsah některých částí nedostačuje
	N – nedostatečné

<b>2. Odborná správnost</b>	
x	<b>A - výborná, bez závažnějších připomínek</b>
	B - velmi dobrá, s ojedinělými drobnými závadami (nejasnost výkladu, chyby ve vzorcích nebo chemických názvech, nedokonalý popis metod nebo výsledků)
	C - uspokojivá, s čtenějšími drobnými závadami
	N - nevyhovující, s hrubými chybami

<b>3. Uvedení použitých literárních a j. zdrojů</b>	
	A - bez připomínek, všechny převzaté údaje s citací zdroje, celkový počet citací odpovídá charakteru práce
	B - uspokojivé, s občasnými neobratnostmi zej v umístění odkazů, nebo s celkově nižším počtem citací
x	<b>C - s vážnějšími závadami, např. převažují "nestandardní" odkazy na učebnice, přednášky, webové stránky, nebo se ojediněle vyskytuje opominutí odkazu na zdroj převzatých dat</b>
	N - nevyhovující, velmi málo citací, ev. rysy plagiátu (časté opomíjení odkazu na zdroj převzatých dat, popř. opsání velkých částí textu)

<b>4. Jazyk práce</b>	
x	<b>A - výborný, práce je napsána čtivě a srozumitelně, bez závažnějších gramatických n. pravopisných chyb</b>
	B - velmi dobrý, ojedinělé stylistické neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby
	C - uspokojivý, čtenější slohové neobratnosti, gramatické n. pravopisné chyby, ojediněle se vyskytují obtížně srozumitelné n. nejednoznačné formulace
	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

<b>5. Formální a grafická úroveň práce</b>	
x	<b>A - výborná, bez překlepů a chyb ve formátování</b>
	B - velmi dobrá, ojedinělé chyby formátu citací, překlepy, chybějící zkratky apod.
	C - uspokojivá, s ojedinělými většími (např. vynechání stránky) nebo čtenějšími drobnými chybami
	N - nevyhovující, s četnými hrubými chybami

## Případný slovní komentář k bodům 1. až 5. :

Předložená bakalářská práce se zabývá studiem elektrosprejových hmotnostních spekter komplexů železnatých iontů s některými benzenovými deriváty a flavonoidy (vitamíny P). Téma práce je zajímavé a zjištěné závěry mají význam pro lepší porozumění biologickému chování zkoumaných látek. Studie je dle mého názoru velice kvalitní a její experimentální provedení je na dobré úrovni. Zejména lze vysoce hodnotit správné interpretace tandemových CID spekter, včetně některých komplikovanějších mechanismů. Lze však vytknout menší nedostatky, především v literárním přehledu a dále při interpretaci některých hmotnostních spekter.

Str. 7

- Hmotnostní spektrometrie sice převádí molekuly na ionty, ale je důležité zdůraznit, že se pracuje s ionty v *plynné fázi* (v řadě případů dokonce pouze převádí ionty v roztoku na ionty v plynné fázi)
- Nemá mnoho smyslu udávat požadované množství vzorku pro hmotnostní spektrometrii jedním hmotnostním údajem (např. v pg jak činí autorka), protože v dnešní době se rozmezí molární hmotnosti analytů v hmotnostní spektrometrii rozprostírá v rozmezí 4-5 řádů. Limity detekce a kvantifikace v hmotnostní spektrometrii navíc záleží na kombinaci příliš mnoha faktorů.
- Při hodnocení výhod a nevýhod hmotnostní spektrometrie se autorka dopouští určitých iritujících zjednodušení. Není úplně pravda, že náklady na vakuovou techniku činí hmotnostní spektrometrii příliš drahou (uváděná reference 2 patrně popisuje nadstandardně drahý hmotnostní spektrometr), na druhé straně má hmotnostní spektrometrie řadu jiných omezení a nevýhod.
- Elektrosprejová ionizace je samozřejmě mnohem univerzálnější a její použití pro „přesun nabitých iontových komplexů kovů do plynné fáze“ je naopak spíše okrajové.
- Nobelova cena za rok 2002 byla udělena za „vývoj metod pro identifikaci a strukturní analýzu biologických molekul“. Z toho jedna polovina byla udělena za rozvoj metod nukleární magnetické rezonance a druhou polovinu sdíleli John Fenn a Koichi Tanaka za vývoj měkkých ionizačních metod pro hmotnostní spektrometrii. Reference 5, uváděná autorkou v této souvislosti, je irelevantní.
- Bylo by vhodné opatřit Úvod obecně přijímanými referencemi z oblasti elektrosprejové hmotnostní spektrometrie a větším počtem relevantních prací z oblasti elektrosprejové ionizace organokovových komplexů.
- Autorka správně popisuje elektrosprejové uspořádání na použitém hmotnostním spektrometru, ale pro úplnost je třeba doplnit, že elektrosprej může fungovat i s nekovovou kapilárou či bez *zmlžovacího* plynu.
- Není pravda, že „ESI pro biomolekuly je proveditelná pouze s vodným nebo alkoholovým roztokem“. Acenotril je pravděpodobně nejpoužívanější organické rozpouštědlo při elektrosprejovém stanovení trypsinovaných bílkovin.
- Je otázka, zda je v dnešní době posunu k polárním systémům správné nazývat chloroform a dichlormethan polárními rozpouštědly.

Str.9

- Nemá smysl říkat „bílkoviny a feritiny“, neboť feritiny jsou bílkoviny.

Str. 10

- Věta „ flavonoidy se vyskytují ...ve formě aglykonů s fenylovým kruhem na uhlíku C-2“ je nevhodně a nelogicky převzata z literatury. Aglykony jsou obecně jakékoliv molekuly ve kterých byla glykosylová skupina nahrazena vodíkem. Navíc není pravda, že fenylový kruh musí být u flavonoidů v poloze C-2, viz například struktura izoflavonu, Schéma 3f.

Str. 11

- Věta „Kromě antioxidační aktivity.....chrání biologické molekuly proti oxidaci“ je opět nelogická.

Str. 12

- Je zavádějící nazývat různé podmínky nastavení elektrospreje tvrdou nebo měkkou ionizací, doporučil bych spíše termín měkké a tvrdé podmínky ionizace.

Str. 14

- Navrhuji nehovořit o grafech, ale spektrech. Místo věty „První graf ukazuje“ doporučuji například „ Spektrum na panelu A znázorňuje“

Str. 15

- Schéma 5 je zatíženo celou řadou nepřesností a není jasna jeho interpretace. Zaprvé není možné udávat napětí na prvcích iontové optiky v eV, neboť se jedná o jednotku energie. Pokud správně rozumím, tak Schéma 5 má demonstrovat nozzle-skimmer disociaci iontů  $m/z = 127$  a  $109$ . Jednoduchým výpočtem rozdílu napětí mezi kapilárou a trubkovou čočkou lze zjistit, že potenciálové rozdíly v panelech a)-d) jsou 64.4V, 68.1 V 118.5V a 104.2V, to znamená,

že rozdíly mezi jednotlivými panely neodpovídají logické optimalizaci. Protože jsou však spektra normalizována, tak je poměrně obtížné dedukovat něco o intenzitě sprejovaných komplexů. Autorkou zmiňované nečistoty se vyskytují především ve spektru na panelu b) a jedná se o  $m/z$  279 (proponovaný dibutylftalát) a  $m/z$  391 (protonovaný diisooktylftalát). Jejich výskyt lze vysvětlit použitím "katederního metanolu", ale intuitivně bych očekával, že bude více konzistentní.

Str. 16

- Ion  $m/z = 201$  má dvě molekuly vody, ne jednu (opakovaně).

Str. 24

- Místo „při nižší energii“ má být „při vyšší energii“ (dvakrát za sebou).
- Diskutovaná ztráta je znázorněna ve schématu 18, nikoliv 19

## B. Obhajoba

### *Dotazy k obhajobě*

- Jak si autorka vysvětluje, že látky s antioxidačním účinkem mají ve větším množství „nepříznivý vliv na lidské zdraví hlavně kvůli jejich prooxidativním... účinkům“? Je v literatuře k dispozici solidní hypotéza?
- V Experimentálních podmínkách chybí informace o složení sprejovaného rozpouštědlového systému a průtokové rychlosti. Jaké podmínky byly tedy použity?
- Byly udělány pokusy o relativní zvýšení komplexu  $m/z = 377$  ve spektru Schéma 16? Existuje například koncentrační závislost?
- Je zajímavé, že orto-dihydroxybenzen ztrácí ion  $\text{FeOH}^+$ , zatímco meta-dihydroxybenzen ztrácí neutrální  $\text{Fe}(\text{OH})_2$ . To dle mého názoru nelze vysvětlit silou vazby mezi železem a OH skupinami. Je možné, že jde o odlišné redox chování komplexů? (Zdá se mi, že  $\text{FeOH}^+$  existuje i v CID spektru komplexu 3-hydroxy-2-methyl-4-pyronu při vyšší energii...)
- Ztráty  $m/z = 9$  jsou dobře vidět zejména ve spektru na obr. 11. Jaké jsou předpokládaná oxidační čísla železa v dvakrát nabitých komplexech?

Stanovisko k opravě chyb v práci:

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

## C. Celkový návrh

Práci doporučuji k přijetí k dalšímu řízení: **ANO** / ~~NE~~

Navrhovaná celková klasifikace: **v ý b o r n ě**

Datum vypracování posudku: 1.6.2010

Jméno a příjmení, podpis oponenta:

Michael Volný