

Posudek oponenta diplomové práce

Jméno a příjmení uchazeče/ky: Nicole Vincková

Název práce: Molekulární rozeznávání v plynné fázi: Chirální rozeznávání

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

1. Rozsah DP a její členění	
x	A - přiměřené, odpovídají charakteru DP a významu jednotlivých částí
	B - nevyrovnané, členění není logické nebo rozsah jednotlivých částí nekoresponduje s jejich významem
	C - uspokojivé, rozsah některých částí nedostačuje
	N - nedostatečné

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

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

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

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

Případný slovní komentář k bodům 1. až 5. :

Práce je věnována atraktivní problematice chirálního rozlišení pomocí hmotnostní spektrometrie. Je zpracována na 63 stranách v klasickém členění – úvod, teoretická část, experimentální část a výsledky, závěr a seznam použité literatury. Obsahuje 56 obrázků, schémat a grafů a 54 literárních odkazů.

Rozsah **teoretické části** odpovídá rozsahu běžném pro tento typ prací a náplň jednotlivých kapitol odpovídá zaměření práce. Zpracování teoretické části vypovídá o tom, že autorka se v problematice dobře orientuje. Přesto lze nalézt řadu zjednodušení a chyb, z nichž vybírám následující:

str. 8., odstavec 3.: „Molekulární rozeznávání enantiomerů v asymetrických vazebných centrech enzymů, peptidů, nebo jiných biomolekul (obecně ale také jakýchkoliv jiných chirálních molekul) je popsáno přes minimálně třibodovou interakci, která může být přitažlivá nebo odpudivá (Obr. 1.1).“ Jde o zjednodušení. Z formulace by vyplývalo, že interakce by mohla být jen odpudivá. To by ale nevedlo k efektivní chirální diskriminaci. Ve skutečnosti jde o přitažlivé interakce nebo (častěji) o kombinace přitažlivých a odpudivých sil.

str. 9., poslední odstavec.: „...je schopnost chirálních molekulárních systémů specificky rozpoznávat opticky aktivní sloučeniny“. Lépe snad: „...optické izomery“

str. 10., věta: „(Teicoplanin) Má výbornou enantioselektivitu pro aminokyseliny, peptidy, alfa-hydroxykarboxylové kyseliny a množství neutrálních analytů zahrnující cyklické amidy a aminy“ Aminy není vhodné řadit k neutrálním sloučeninám, jde o protolyty a jejich náboj v roztoku je řízen hodnotou jeho pH.

str. 11., věta: „Nejintenzivnější studie na téma chirální rozeznávání v plynné fázi byly provedeny pomocí elektrosprejové ionizace a metody ionizace laserem za přítomnosti matrice (MALDI), kde agregáty vznikají při desorpci nebo odpařování z tekuté matrice“. Skutečný stav a skupenství matrice během MALDI experimentu je stále předmětem mnoha diskusí. Přesto není vhodné mluvit u běžné MALDI techniky o uvolňování agregátů z tekuté matrice.

str. 14., věta: „Pozoroval zvláštní chování roztoku kyseliny vinné na dně lahve od vína a na jejím hrdle“. Šlo o pozorování krystalů, nikoliv roztoku.

str. 16., věta: „Roztok (pro ESI) je složen z těkavých rozpouštědel a iontových analytů s velmi nízkou koncentrací nejčastěji 10^{-6} - 10^{-3} mol/l. Diskutabilní je těkavost rozpouštědel (např. voda) a iontovost analytů – nemusí jít o iontové analyty, obecně ale musí jít o látky ionizovatelné. Kromě toho, koncentrace měřených látek 10^{-3} mol/l je v oblasti hmotnostní spektrometrie spíše vysoká.

str. 17., věta: „Mezi výhody ESI patří to, že nedochází k degradaci tepelně citlivých látek, protože systém není teplotně závislý.“ Tato formulace není úplně šťastná. Výtěžek iontů při ESI je poměrně výrazně závislý na teplotě a teplota je parametrem optimalizovaným snad u všech ESI zdrojů. Nicméně je pravda, že ESI je obecně vhodná ionizační technika i pro analýzu teplotně labilnějších látek.

Překlep v této větě: „patří“ --> „patří“.

str. 17. kapitola 2.1.3., popis tandemové hmotnostní spektrometrie má dva nedostatky:

1: zavádějící je použití symbolů Q1 a Q2 (bez vysvětlení zkratk), zejména s ohledem na následující kapitolu o trojitém kvadrupólu.

2. chybí informace o “tandemu v čase”, která je v současnosti rovněž velmi běžným přístupem (např. použití iontových pastí).

Experimentální část a výsledky podávají přehled provedených experimentů. Tato kapitola obsahuje podstatné informace o měření a o zpracování získaných dat. Během experimentů byla získána řada zajímavých údajů o stabilitě a fragmentačním chování studovaných látek. Snad poněkud strohá je část popisující použitý materiál. Postrádám bližší informace o látkách HexNH_2 a BuNH_2 a měďnaté soli použité pro přípravu ternárních komplexů – identita, zdroj, čistota, způsob přípravy roztoků.

B. Obhajoba

Dotazy k obhajobě

1. Na straně 10 je uvedeno: “Teikoplanin jako chirální selektor zajišťuje integritu chirálních stacionárních fází.” Může autorka tuto myšlenku blíže vysvětlit?

2. str. 46, vztah 3.4 a předposlední odstavec textu na těže straně. Je uvedeno, že nastaly problémy s kolísáním konstantního tlaku sekundárního butylaminu v kolizní cele (tedy kolísání [C]). Toto kolísání bylo opraveno měřením referenční sloučeniny. Zde by mě zajímalo, jaká referenční látka byla použita. Na str. 53 je dále uvedeno, že velké experimentální rozdíly mezi rychlostními konstantami svědčí o velké experimentální chybě, která je do experimentu zanesena nepřesným měřením tlaku neutrálního reaktantu. Námětem do případné diskuse by tedy mohlo být, v čem autorka na základě svých zkušeností vidí možnosti vylepšení experimentálního uspořádání pro měření přesných hodnot rychlostních konstant.

Stanovisko k opravě chyb v práci:
opravný lístek **JE** podmínkou přijetí práce

C. Celkový návrh

Práci doporučuji k přijetí k dalšímu řízení: **ANO**

Navrhovaná celková klasifikace: **velmi dobře**

Datum vypracování posudku: 24. května 2011

Jméno a příjmení, podpis oponenta:

doc. RNDr. Petr Bednář, Ph.D.