



RNDr. Vladimír Vrkoslav Ph.D.
UOCHB AV ČR, v.v.i.
Hmotnostní spektrometrie
Flemingovo nám. 2
166 10 Praha 6

Věc: **Posudek oponenta diplomové práce**

Jméno a příjmení uchazečky: **Bc. Zuzana Flenerová**

Název práce: **Analýza produktů metateze kardanolů pomocí metody HPLC-MS/MS**

Diplomová práce Bc. Zuzany Flenerové byla klasicky rozčleněna do pěti hlavních částí: Úvod, Teoretická část, Experimentální část, Výsledky a diskuze a Závěr. Jednotlivé části svým rozsahem a charakterem odpovídají požadavkům kladeným na diplomové práce. Hlavní cíl diplomové práce, analýza produktů metateze, kardanolů, byl splněn. V prvním kroku byla optimalizována HPLC metoda pro separaci směsi produktů chemické reakce s UV a MS detekcí. Produkty reakce byly také charakterizovány IČ, NMR a UV/VIS spektrometrií. Optimalizovaná HPLC metoda byla využita pro preparativní izolaci produktů. Ramanovou spektrometrií byly ve frakcích identifikovány *cis* a *trans* izomery. Pozitivně hodnotím, že se autorka kromě HPLC seznámila také s dalšími výše zmíněnými analytickými technikami. Vzhledem k názvu diplomové práce bych však předpokládal, že postup optimalizace HPLC bude popsán detailněji. Významná část práce se zabývá mechanismem tvorby $[M+55]^+$ v APCI iontovém zdroji za přítomnosti acetonitrilu, jejíž fragmentací vznikají ionty charakterizující polohu dvojně vazby. V práci byla navržena struktura aduktu $[M+55]^+$ a mechanismus jeho tvorby. S mechanismem metateze souvisí i poloha dvojně vazby. Protože ale nebyla popsána aplikace této metody pro určení polohy dvojně vazby produktů metateze, témata nebyla propojena přímo.

Formální a grafická i jazyková úroveň práce vyhovuje standardům vyžadovaným u diplomových prací. Drobných formálních chyb se však autorka nevyvarovala. Např. na straně 22 je nepřesná formulace „dávkovací smyčky jsou většinou šesticestné ventily“, není uveden výrobce HPLC kolony a obrázky v kapitole EI-MS jsou před souvisejícím textem. Přehlednost a snadnější pochopitelnost práce by se zvýšila při rozšíření některých názvů kapitol a zpřesnění popisu. Např. v kapitole nazvané „HPLC-MS“ se diskuze opírá o HPLC-UV chromatogramy, ale pouze u posledního obrázku v kapitole (Obr. 13, str. 39) jsou zmíněny hodnoty *m/z*. Následující kapitola nazvaná „MS/MS“ je uvedena slovy „Jednotlivé frakce“, analýza frakcí je však zmiňována v experimentální části jen ve spojitosti s Ramanovou spektrometrií.

Diplomovou práci Bc. Zuzany Flenerové doporučuji k obhajobě.

Dotazy k obhajobě

1. Z kontextu usuzuji, že analýza produktů reakce popisovaná v kapitole MS/MS byla prováděna online v uspořádání HPLC/ESI-MS/MS. Je má domněnka správná, nebo se jednalo o analýzu odebraných frakcí?
2. Pro lepší propojení části věnované aduktům $[M+55]^+$ jsem očekával určení polohy dvojně vazby produktů metateze touto technikou. Pokusila jste se o aplikaci zmíněné techniky?

3. Při metatezi vznikají *cis-trans* izomery. Lze vysvětlit, proč vzniká větší množství isomeru *trans*? Lze případně tento jev ovlivnit reakčními podmínkami?
4. Jakým způsobem bylo technicky řešeno přivedení studovaných nenasycených uhlovodíků do srážkové cely T-wave?

Datum vypracování posudku: 26.5. 2015

Jméno a příjmení, podpis oponenta: RNDr. Vladimír Vrkoslav Ph.D.