

Posudek oponenta na diplomovou práci

Autor diplomové práce: Vladimíra Jandovská

Název diplomové práce: Stanovení biologicky aktivních látek ve chmelu metodou LC/HR-MS

Studijní obor: Analytická chemie

Označte křížkem (D je nejhorší A je nejlepší)	D	C	B	A
Úroveň definování cílů práce a kvalita jejich splnění <ul style="list-style-type: none"> ▪ jsou cíle práce jasně formulované a jsou dosažené výsledky vytčeným cílům odpovídající 				A
Originalita práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ přináší původní vědecké výsledky; rozšiřuje současná řešení problému; je variantou známých přístupů; opakuje známá řešení 			B	
Přínos práce pro analytickou chemii <ul style="list-style-type: none"> ▪ přináší zcela novou metodiku; výrazně vylepšuje dosavadní analytické postupy; je určitou variantou používaných analytických postupů; využívá standardních analytických metodik a postupů pro řešení problémů z jiných oborů 				A
Forma členění práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ vhodnost členění na kapitoly, vyváženost rozsahu jednotlivých kapitol, přiměřenost počtu obrázků a tabulek 			B	
Zpracování úvodu k řešené problematice <ul style="list-style-type: none"> ▪ informační bohatost úvodních kapitol, relevantnost a úplnost citované literatury 		C		
Zpracování experimentální části práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ kvalita a úplnost popisu použitých materiálů a metodik 			B	
Zpracování výsledků práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ způsob zpracování experimentálních výsledků, jejich logické uspořádání a vysvětlení, kvalita dokumentace prezentovaných závěrů 			B	
Jazyk a stylistická úroveň práce		C		
Formální provedení práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ tiskové chyby, forma provedení obrazové a tabulkové dokumentace, dodržování konvencí psaní symbolů veličin, jednotek atp. 			B	
Celkové zhodnocení práce, A–D <ul style="list-style-type: none"> ▪ mělo by akcentovat obecně přístup studenta k řešení a zpracování zadané problematiky 			B	

K předložené diplomové práci mám následující připomínky a dotazy:

Cílem předložené práce je vývoj nových analytických postupů k charakterizaci obsahových látek chmele, zejména ve vztahu k jejich mikrobiální aktivitě. Autorka úspěšně optimalizovala extrakční postup a aplikovala metodu necílené diferenční analýzy na vzorky agaru odebrané ze zóny s inhibovaným růstem mikroorganismů proti kontrolním vzorkům agaru s mikroorganismem. Tímto postupem se jí podařilo detekovat 56 sloučenin s prenylovou a geranylovou funkční skupinou, z nichž 7 bylo možno identifikovat. Práce přináší slibná prvotní data, na která je možno navázat dalšími studiemi. Mé hlavní výhrady se týkají obecného úvodu, který by měl být lépe zpracován, aby autorka prokázala znalost použitých analytických technik. Níže uvádím konkrétní připomínky k této práci.

str. 6 "TI-TOF" má být IT-TOF

str. 8 „... (UHPLC) je jeden z druhů kapalinové chromatografie...“ Jaké znáte další „druhy“ kapalinové chromatografie? Bylo by lepší ... je speciálním typem HPLC, který využívá vyšší separační účinnosti částic $2\mu\text{m}$ a zároveň je kompatibilní se zpětným tlakem kolem 100 MPa, který tyto částice generují.

str. 8 odstavec „Materiály pro stacionární fázi ...“ Opravdu se pro nepolární analyty používá silikagel a pro polární analyty C18? Prosím vysvětlete separační principy i) reverzní fáze, ii) normální fáze a iii) HILIC.

str. 9 „... které se mohou dále rozpadat...“ K fragmentaci nedochází samovolně, jaké jsou hlavní principy fragmentace iontů ve hmotnostní spektrometrii?

str. 9 „Mohou vznikat kladně M^+ nebo záporně M^- ...“ Mohou vznikat radikálové ionty? Pokud ano v jakých případech?

str. 9 Jak se souhrnně nazývají techniky ESI, APCI a APPI a co je jejich společnou charakteristikou z hlediska fragmentace?

str. 10 „... střídavého napětí, vloženého na tyče, nechá projít...“ poněkud svérázný popis principu selekce na Q hmotnostním filtru, jaké matematické vyjádření popisuje pohyb iontu v kvadrupólovém filtru?

str. 10 „Kvadrupólový analyzátor (Q) může pracovat ve dvou režimech...“ Jaké jsou výhody a nevýhody obou režimů (skenování/fixní nastavení)?

str. 10 „V průletových analyzátoch...“ Jaké znáte další typy průletových analyzátorů?

str. 11 odstavec „Iontová past“ Takto nelze popsat princip IT, opravdu slouží k zadržování elektronů?! Velmi špatná volba referencí pro přípravu tohoto odstavce.

str. 11 „... magnetu s vysokým statickým...“ se silným statickým...

str. 11 „... se synchronizují do oblaků.“ ???

str. 12 „... detekce proudového obrazu...“ Můžete prosím objasnit, jak vzniká takový „proudový obraz“?

str. 12 „... frekvencí oscilace...“ Ve kterém směru probíhají oscilace, jejichž frekvence slouží k přesnému určení m/z ?

str. 12 „Rozlišovací schopnost orbitální pasti...“ Dle mého názoru autorka čerpala při přípravě většiny kapitol o hmotnostní spektrometrii převážně z jednoho zdroje (přednášky prof. Holčapka), který ovšem zapoměla citovat, ale také aktualizovat. V současné době je rozlišení komerčně dostupných přístrojů Orbitrap až 500 tisíc FWHM. Prosím vysvětlete jednotky „FWHM“?

str. 13 odstavec „Detektory“ Chybí správné základní rozdělení dle principu a použití.

str. 13 odstavec „Spojení LC a MS“ Jaké je tedy technické řešení spojení LC-MS?

str. 29 „... kvercetin... koncentraci 1 mg/ml...“ Dle literatury je rozpustnost kvercetin ve vodě menší než 1 mg/mL. Prosím vysvětlit.

str. 29 „Všechny standardní roztoky byly uchovávány při teplotě asi -18 °C“ Jak dlouho byly roztoky skladovány? Nemůže docházet k oxidaci některých analytů?

str. 30 „Otvor byl naplněn mletými sušenými chmelovými hlávkami.“ Jaké množství chmele bylo aplikováno?

Obr. 3.2 Na obrázku není vůbec patrná hranice inhibiční zóny.

Předloženou diplomovou práci **doporučuji** k dalšímu řízení.

V Brně, dne 1. září 2016

podpis oponenta
PharmDr. Zdeněk Spáčil, PhD