Posudek oponenta na diplomovou práci

Autor diplomové práce: Michaela Obluková
Název diplomové práce: Studium nových syntetických drog metodou LC-MS/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 ▪ jsou cíle práce jasně formulované a jsou dosažené výsledky vytčeným cílům odpovídající				**x**
Originalita práce ▪ přináší původní vědecké výsledky; rozšiřuje současná řešení problému; je variantou známých přístupů; opakuje známá řešení				**x**
Přínos práce pro analytickou chemii ▪ 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			**x**	
Forma členění práce ▪ vhodnost členění na kapitoly, vyváženost rozsahu jednotlivých kapitol, přiměřenost počtu obrázků a tabulek				**x**
Zpracování úvodu k řešené problematice ▪ informační bohatost úvodních kapitol, relevantnost a úplnost citované literatury				**x**
Zpracování experimentální části práce ▪ kvalita a úplnost popisu použitých materiálů a metodik				**x**
Zpracování výsledků práce ▪ způsob zpracování experimentálních výsledků, jejich logické uspořádání a vysvětlení, kvalita dokumentace presentovaných závěrů				**x**
Jazyk a stylistická úroveň práce				**x**
Formální provedení práce ▪ tiskové chyby, forma provedení obrazové a tabulkové dokumentace, dodržování konvencí psaní symbolů veličin, jednotek atp.			**x**	
Celkové zhodnocení práce, A–D ▪ mělo by akcentovat obecně přístup studenta k řešení a zpracování zadané problematiky				**x**

K předložené diplomové práci mám následující připomínky a dotazy:

Práce představuje kvalitně zpracovanou studii fragmentačních spekter vybraných syntetických drog a na modelovém případě ukazuje jejich využití pro identifikaci drog a jejich metabolitů. Fragmentační spektra jsou náležitě komentována a doplněna návrhem fragmentačních schémat. U některých mechanismů si lze představit i alternativní struktury vznikajících iontů, avšak s navrženou interpretací v zásadě souhlasím.

K práci mám tyto dotazy.
1/ Hmotnostní spektra (MS/MS spektra) jsou prezentovaná netradiční formou bodového grafu. Jak byla tato spektra vytvořena, čemu odpovídají jednotlivé body a jejich barva?
2/ V práci byla stanovena pro každou látku optimální kolizní energie. Jak je optimální kolizní energie v této práci definována a jak byla určována?

3/ Ve fragmentačním spektru 4-OH-MC (Obr. 5.11 c) vzniká z prekurzoru *m/z* 180 ion *m/z* 176. Neutrální ztráta 4 Da je velmi nepravděpodobná. Jakým způsobem lze vysvětlit vznik tohoto iontu?
4/ V práci byla měřena fragmentační spektra pouze v úrovni MS/MS. Použitý analyzátor by však umožnil i měření spekter vyšších řádů. Pomohlo by měření spekter MS^3 pro podrobnější studium fragmentačních mechanismů těchto látek?

Předloženou diplomovou práci **doporučuji** / ~~**nedoporučuji**~~ k dalšímu řízení.

V Praze, dne 30. 5. 2016 doc. RNDr. Josef Cvačka, Ph.D.