Posudek oponenta diplomové práce

Jméno a příjmení uchazeče: **Bc. Martin Ansorge**

Název práce: **Stanovení komplexačních konstant metodou částečného plnění a analýzou průtokem způsobené disperze a jejich srovnání s hodnotami stanovenými metodou afinitní kapilární elektroforézy**

Cíle předložené diplomové práce byly jasně definovány a beze zbytku splněny. Práce je jednoznačně přínosem pro fyzikální chemii, neboť nabízí zajímavé srovnání různých metod stanovení komplexačních konstant s využitím instrumentace pro kapilární elektroforézu a přináší užitečné postřehy týkající se použitelnosti jednotlivých metod. Práce je jazykově na vysoké úrovni, je psána srozumitelně a její členění je logické. Obsah i rozsah všech částí jsou adekvátní. Silnou stránkou práce je, že kombinuje simulace a experimentální data, což účinně podporuje diskuzi a posiluje závěry. Oceňuji také to, že při hodnocení omezení jednotlivých metod autor nespoléhá pouze na literaturu, ale vhodnost a spolehlivost postupů ověřuje vlastními simulacemi a experimenty.

K práci mám několik připomínek:

- Při převodu do formátu PDF došlo ke ztrátě většiny závorek v textu a rovnicích. Tento nedostatek uchazeč již odstranil přiložením opravného lístku.
- Je otázkou, nakolik mělo pro tuto konkrétní práci smysl testovat pomocí simulací metodu dle Nilssona vzhledem k tomu, že konečným cílem bylo sledování komplexace profenů neutrálním cyklodextrinem. Je zřejmé, že mobilita komplexu analytu s cyklodextrinem se bude výrazně lišit od nulové mobility samotného cyklodextrinu a rozdíl bude dosahovat desítek procent mobility volného analytu (jak autor sám u testovaného systému č. 7 předpokládá). Vyhodnocení experimentu metodou dle Nilssona je zde proto již z principu nevhodné. Provedenou studii vlivu rozdílu v mobilitách na správnost výsledku nicméně považuji obecně za velmi přínosnou.
- Simulace obou modifikací metody částečného plnění byly prováděny pro nespecifikovaný kladně nabitý analyt o hodnotě pK_a = 9,3. Zkoumané profeny jsou však karboxylové kyseliny a v podmínkách experimentu nesou záporný náboj. Obě simulace byly prováděny v základních elektrolytech o různém složení, hodnotě pH a iontové síle. V obou případech se tyto hodnoty lišily od podmínek použitých v experimentu. Na obecné zhodnocení

vhodnosti a mezí použitelnosti daných metod nemají zřejmě tyto rozdíly velký vliv, přesto by bylo logičtější provádět simulaci za podmínek blížících se experimentu. V každém případě by bylo vhodné vysvětlit, proč byly pro simulace zvoleny odlišné podmínky.

- V tabulce 2 je uvedeno, že efektivní délka kapiláry byla 0,044 m, údaje v tabulce 3 však naznačují, že 100% efektivní délce kapiláry odpovídala vzdálenost 0,041 m. Obdobně neodpovídají údaje v tabulkách 4 a 6.
- V popisku k obrázku 8 je uvedeno, že jeden ze záznamů je reprezentován plnou a druhý přerušovanou čarou. Ve skutečnosti jsou však obě čáry plné a jsou odlišeny barevně.

Uchazeči bych rád položil následující **otázky**:

- Na straně 25 píšete, že při použití PF metody byl do základního elektrolytu přidáván polyvinylalkohol. Jaká byla jeho molekulová hmotnost?
- Z jakého důvodu byly simulace prováděny s jiným analytem a za jiných podmínek než experimenty?
- Na straně 43 uvádíte, že vyšší chybu stanovení komplexačních konstant metodou FIDA lze pravděpodobně přičíst proměnné teplotě v kapiláře v průběhu měření. Jaké byly podle Vás konkrétní příčiny proměnlivosti teploty?

Přes některé mírné nedostatky splňuje předložená práce dle mého názoru všechny požadavky kladené na diplomovou práci, a proto ji **doporučuji** k dalšímu řízení a navrhuji hodnocení **velmi dobře**.

Dne 13. 5. 2016 RNDr. Tomáš Křížek, Ph.D.