

POSUDEK OPONENTA NA DOKTORSKOU DISERTAČNÍ PRÁCI

Název práce: Aplikace solvatačního modelu k popisu retence vybraných látek v kapalinové a plynové chromatografii

Kandidát: Mgr. Štěpán Jirkal

Oponent: doc. Dr. RNDr. David Sýkora

Disertační práce je zaměřena na studium retence zvolených látek na stacionárních fázích v oblasti kapalinové a plynové chromatografie. Vlastní text je rozdělen do tří částí. V první rozsáhlé kapitole autor na 77 stranách podrobně diskutuje retenční modely v chromatografii. Především klade důraz na modely: Linear free energy relationships (LFER), Linear solvent strength theory (LSST) a Abrahamův solvatační model (LSER). Stručně popsány jsou ale i další postupy včetně historických a jiných souvislostí. Dále se kandidát věnoval objasnění problematiky vícenásobné lineární regrese včetně tvorby regresního modelu. V závěru první části je podána informace o zdrojích experimentálních dat získaných kapalinovou chromatografií. V druhé kapitole, sepsané na 20 stranách, jsou podány výsledky popisu retence 21 látek modelem LSER na koloně LiChrospher 60 RP-select B ve směsi methanol-voda a acetonitril-voda. Kapitola třetí shrnuje autorovy poznatky získané v oblasti plynové chromatografie pro chování C5 až C8 alkenů na skvalanu a polydimethylsiloxanu. Rozsah kapitoly je 36 stran. Text je doplněn rozsáhlou přílohou obrázků a tabulek.

Disertační práce čerpá z experimentálních dat naměřených v diplomových pracích a publikacích kandidáta samotného, ale i a dalších autorů. Opírá se o dvě publikace v impaktovaných časopisech kandidáta jako prvního autora. V rámci disertační práce jsou již publikovaná data dále podrobněji a nově analyzována. Práce je sepsána velmi pečlivě s naprostým minimem formálních nedostatků/překlepů. Přestože se jedná o složitou problematiku, kterou není snadné jasně a přehledně popsat včetně přístupu k interpretaci experimentálních dat, je nutno konstatovat, že se autor zadání zhostil dobře. Také skutečnost, že řada výstupů prošla recenzním řízením v kvalitních časopisech, dokládá erudici kandidáta a schopnost vědecky pracovat. Cíle zadání byly splněny.

Po přečtení práce mám na autora jeden dotaz týkající se textu na stranách 76-77 a Tabulky P3. Koeficienty R^2 mezi vypočítanou a naměřenou hodnotou retence, $\log k$, jsou při některých složeních mobilních fází velmi malé (např. pro 95 % acetonitrilu ve vodě), ale chyby predikce jsou přitom často i v takových případech poměrně malé, často i menší než v situaci daleko lepších korelace (např. pro složení mobilní fáze 5 % acetonitrilu ve vodě). Jak si tento efekt vysvětlujete?

Celkově lze shrnout, že kandidát splnil požadavky kladené na disertační práci a doporučuji ji k obhajobě.

V Praze, 2. září 2016

David Sýkora

Vysoká škola chemicko-technologická

Ústav analytické chemie

Technická 5

166 28 Praha