

UNIVERZITA KARLOVA
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ
Katedra analytické chemie

Studijní program: Farmacie

Posudek oponenta diplomové práce

Autor/ka práce: **Jakub Halad**

Vedoucí/školicel/ka práce: RNDr. Hana Vlčková, Ph.D.

Rok obhajoby: 2017

Konzultant/ka práce:

Oponent/ka práce: Mgr. Maria Khalikova, Ph.D.

Název práce:

Vliv jednotlivých módů TOF analyzátoru na linearitu a citlivost UHPLC-HRMS metody

Rozsah práce: počet stran: 77, počet obrázků: 45, počet tabulek: 18, počet citací: 46

Práce je: experimentální

- a) Cíl práce je: zcela splněn
- b) Jazyková a grafická úroveň: výborná
- c) Zpracování teoretické části: velmi dobré
- d) Popis metod: velmi dobrý
- e) Prezentace výsledků: dobrá
- f) Diskuse, závěry: dobré
- g) Teoretický či praktický přínos práce: velmi dobrý

Doporučuji diplomovou práci k uznání jako práci rigorózní

Případné poznámky k hodnocení: Práce je sepsána pečlivě a zpracována po odborné stránce na velmi dobré úrovni. Téma diplomové práce je zajímavé a má přínos pro řešení praktických úloh pomocí hmotnostního spektrometru využívaného na katedře analytické chemie. Teoretická část je popsána velmi dobře, shrnuje základní informace o ionizačních technikách, hmotnostních analyzátoch, také stručný a přesto dostačující popis využívaného hmotnostního spektrometru s hybridním analyzátoem. Oceňuji velké množství obrázků zlepšujících přehlednost teoretické části a výsledků, ale musím upozornit na několikrát chybějící popis a také odkaz v textu diplomové práce. Závěr práce je stručný a konkrétní. Dále uvádím některé připomínky a dotazy.

Dotazy a připomínky: V textu chybí odkazy na Tabulky 1, 3 a Obrázky 2, 16, 17, 23, 44 a 45. Tabulky 7 a 8, shrnující informace o studovaných látkách, jsou stejné. Podle mého názoru by stačila pouze jedna z nich.

V rámci hodnocení jednotlivých módů analyzátorů, které jsou určeny pro zlepšení rozlišovací schopnosti, bych očekávala hodnocení správnosti naměřených hodnot m/z , tzn. odchýlení od přesných hmot vybraných analytů.

V diplomové práci byl zkoumán vliv módů na linearitu a korelační koeficienty, a to jak pro standardy, tak v přítomnosti matrice. Očekávala bych v práci obrázek znázorňující kalibrační křivky. Podle mého názoru, rozlišení by spíše mělo mít vliv na lineární rozsah, než na korelační koeficient.

S opatrností bych zaměňovala termíny "citlivost" a LOQ, jelikož o citlivosti metody vypovídá spíše sklon kalibrační křivky.

Na obrázku 23 je chybně uveden název látky Lovastatin lakton. Chemická struktura odpovídá látce Lovastatin kyselina.

Str. 49 – obávám se, že podle popsaného postupu přípravy kalibračních roztoků s matricí ředěním, dochází k odlišnému finálnímu obsahu matrice ve vzorcích, což by mohlo způsobit odlišné matrixové efekty a také intenzitu pozadí během měření.

Str. 51 – jak se mohla hodnotit linearita v rozsahu 100 – 0,01 ng/mL, když LOQ všech látek byl nejméně 0,02 ng/mL?

Str. 52 – proč některé látky byly stanovené v pozitivním a negativním módu zároveň a lovastatin kyselina jen v negativu, i když poskytuje sodíkový adukt, který by mohl být taktéž stanoven v pozitivu?

Jak byste vysvětlil důvod vzniku aduktů lovastatinu a pravastatin laktonu se sodíkem, který nebyl přidán do mobilní fáze a vzorků?

Jaký máte názor na uplatnění čtyř rozlišovacích módů daného hmotnostního analyzátoru?

Pro řešení jakých praktických úloh je potřeba využít tak vysoké rozlišovací schopnosti na úkor citlivosti?

I přes uvedené připomínky splňuje DP všechny požadavky kladené na tento typ práce. Proto ji bez jakýchkoliv pochybností mohu doporučit k obhajobě.

Celkové hodnocení, práce je: velmi dobrá, k obhajobě: doporučuji

V Hradci králové dne 25.5.2017

.....
podpis oponentky / oponenta