

Oponentský posudek diplomové práce  
z oboru Klinická a toxikologická analýza

**QSPR a elektrochemická oxidace 4-(benzylsulfanyl)pyridinů**  
autor DP: Markéta Brožíková

Předložená diplomová práce se zabývá studiem nově syntetizovaných derivátů 4-(benzylsulfanyl)pyridin-2-karbonitrilů a 4-(benzylsulfanyl)pyridin-2-karbothioamidů, a to především korelacemi jejich oxidačních půlvlnových potenciálů s příslušnými Hammetovými  $\sigma$  konstantami substituentů na fenylovém jádře a chromatografickým chováním v systému RP HPLC s hodnotou hydrofóbní  $\pi$  konstanty a hodnotou rozdělovacího koeficientu oktanol-voda. V závěru práce pak byly připraveny a pomocí HPLC s MS detekcí i identifikovány produkty elektrooxidace vybraných tří derivátů a na tomto základě byla i navržena reakční schemata probíhajících reakcí. Diplomová práce je sepsána pečlivě a čtivě, je členěna standardním způsobem, obsahuje přehledné tabulky a jasné obrázky a je doplněna odpovídajícím seznamem citovaných prací z oboru a tak splňuje všechny požadavky na diplomové práce ve výše uvedeném oboru.

K předložené práci mám jen několik připomínek či námětů k diskuzi:

- Seznam zkratk mohl obsahovat české ekvivalenty anglických zkratk QSAR, QSER, QSPR (v textu je lze nalézt)
- Legendy k obrázkům a tabulkám jsou psány zbytečně malým fontem
- Místo bodu tání by se mělo spíše užívat výrazu teplota tání
- Str. 18: uvedeno Ficherova vs. Fischerova elektroda
- Str. 20: Jsou parametry dle Viswanadhana natolik známé, že se již necituje zdroj?
- Obr. 3.1 na str. 23: Dle rovnice 3.2 byla korelace počítána pro 13 derivátů, v obr. 3.1 je jich však všech 14. Byla opravdu jedna látka vyloučena? Která?
- Str. 34 a předchozí obrázky: Některé chromatografické píky jsou prakticky symetrické, jiné ne. To naznačuje různé interakce v procesu dělení (průchodu kolonou) pro různé deriváty. Nemůže toto přispívat k horšímu výsledku korelací?

V práci je pár překlepů typu benzyzl, bakteriální ..., které však nemají vliv na kvalitu této diplomové práce. Vzhledem k výše uvedeným skutečnostem plně doporučuji diplomovou práci Markéty Brožíkové k přijetí k obhajobě.

Praha, 16.5.2006

Doc. RNDr. Jiří Zima, CSc.