Prof. RNDr. Věra Pacáková, CSc.
Univerzita Karlova v Praze
Přírodovědecká fakulta
Katedra analytické chemie
ALBERTOV 2030, 128 40 Praha 2, ČR
tel. + fax +420224913538, pacakova@natur.cuni.cz
V Praze dne 5.12.2009

Oponentský posudek disertační práce Mgr. Květy Kalíkové „Studium interakcí podílejících se na mechanismu separace v chromatografických separačních systémech“

Disertační práce Mgr. Květy Kalíkové představuje okomentovaný souhrn pěti publikací, věnovaných studiu interakcí v kapalinové chromatografii.

První část disertace je věnována porovnání 3 chirárních stacionárních fází na bázi teikoplaninu, teikoplanin aglykonu a methylovaného teikoplanin aglykonu s využitím metody lineárních vztahů volných energií (LFER). Tento přístup, který našel uplatnění zejména v plynové chromatografii, se v současné době aplikuje s úspěchem i v kapalinové chromatografii.

Druhá část je věnována studiu systémových píků v RP HPLC. Jejich výskyt může velmi zkomplikovat optimalizaci separace i interpretaci dat a proto porozumění těmto jevům je velmi důležité.

Třetí část má charakter aplikační, zahrnuje optimalizaci separace estrogenů, benzodiazepinů a enantioseparaci cloprostenolu.

Výsledky byly publikovány v časopise journal of Separation Science (2 práce), v Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis (1 práce), v Chemických Listech (přehledný článěk), kde prošly recensním řízením. Jedna práce byla publikována ve sborníku z konference. Autorka kromě toho uvádí obsáhlý seznam příspěvků na konferencích (celkem 20 - zúčastnila se všech konferencí osobně?)

Cíle disertace byly splněny. Byly získány nové cenné poznatky. Autorka dosáhla významných výsledků, které jsou přímo aplikovatelné v praxi. Snad jediná moje námitka se týká poměrné nesourodosti celé disertační práce.

Práce je logicky členěna, výsledky jsou správně interpretovány. Po formální stránce není co práci vytknout.

K práci mám několik dotazů či připomínek:

1. V 1. části jsou citovány spíše starší publikace, ačkoliv existuje v současné době řada prací zabývajících se vztahem mezi LFER a chromatografickými daty, např. A. Del Rio, J.Sep.Sci. – review, K.Héberger, J.Chromatogr. A 1158 (2007) 273-305 - review a další).
2. Jedním z cílů práce je aplikovat získané poznatky na separace konkrétních směsí analytů. Jak byly poznatky z první studie aplikovány v aplikační části?
3. V první části nejsou uvažovány žádné deskriptory, které by se vztahovaly k chiralitě. V přehledném článku A. Del Rio, J.Sep.Sci. 2009, 32, 1566-1584 jsou uvedeny různé deskriptory, které se vztahují k chirálnímu chování. Byly testovány některé z nich? Lze na základě získaných výsledků předpovědět chirální separaci?

Závěr:

Výsledky disertace představují významný příspěvek k vývoji a využití HPLC a mají reálné uplatnění v analytické praxi. Autorka prokázala velmi dobré teoretické znalosti zkoumané problematiky a schopnost tvůrčí vědecké práce. Doporučuji, aby disertační práce Mgr. Květy Kalíkové byla přijata k obhajobě a aby se stala základem pro udělení vědecké honosti Ph.D.