

Oponentský posudek na diplomovou práci vypracovanou posluchačem

Bc. Vojtěchem Vágnerem

na téma

"Vztahy mezi strukturou a retenčním chováním derivátů benzoxazinu"

Cílem předkládané diplomové práce bylo studium retenčního chování 40 derivátů benzoxazinu ve vysokoúčinné kapalinové chromatografii na reverzní stacionární fázi C18 a nalezení korelací mezi retenčním faktorem studovaných derivátů a hydrofobními substituentovými konstantami či logaritmem rozdělovacího koeficientu oktanol-voda.

U nově syntetizovaných derivátů benzoxazinu byl prokázán antimykobakteriální účinek, a tudíž tyto látky mohou být potencionálními antituberkulotiky a antileprotiky. Biologický účinek studovaných látek může být v přímém vztahu s retenčním chováním těchto látek v reverzní kapalinové chromatografii, neboť hydrofobnost molekuly dané látky určuje retenční chování v chromatografii i prostupnost přes biologické membrány v živých organismech. Vhodně zvolená metoda QSRR (Quantitative Structure-Retention Relationship) pak umožňuje kvantifikovat vztah mezi strukturou studovaných látek a jejich chromatografickým chováním či biologickou aktivitou.

Po formální stránce je předložená diplomová práce vypracována velmi přehledně a srozumitelně s vhodně volenou úpravou tabulek i obrázků a žádnými typografickými či stylistickými chybami. Grafická úprava předložené diplomové práce je vynikající. Všechny tyto formální stránky diplomové práce činí tuto práci velmi přehlednou a čtivou.

Také obsahová stránka předkládané diplomové práce je na vynikající úrovni a svědčí o tom, že autor zvládl plánování experimentů a jejich provedení, vyhodnocení, statistické zpracování a prezentaci získaných experimentálních dat, interpretaci získaných výsledků a z nich vyvozených příslušných závěrů. Navzdory všem těmto pozitivním stránkám předkládané práce jsem narazil na některé drobné nepřesnosti a nejasnosti, na které bych rád autora upozornil popřípadě se jej zeptal v následujícím komentáři a otázkách:

1. V práci je používán termín kapacitní poměr, který v dnešní době považujeme spíše za archaický a nahrazujeme jej termínem retenční faktor, který byl doporučen organizací IUPAC.
2. Z práce je zřejmé, že rozdělovací koeficienty oktanol-voda pro nově syntetizované látky jsou v dnešní době převážně počítány teoreticky použitím vhodného počítačového programu. Můžeme se na jejich hodnoty skutečně spolehnout? Neměly by být přece jen určovány experimentálně?
3. V práci se píše o hodnotě indikátorové konstanty $I = 1$, pokud je v molekule dvojně vázaný atom kyslíku a $I = 0$, je-li tento atom nahrazen dvojně vázaným atomem síry. Proč se tento strukturální descriptor nazývá právě indikátorová konstanta?

Závěrem konstatuji, že cíle diplomové práce Bc. Vojtěcha Vágnera byly splněny a že tato práce popisuje kvantitativně vztah mezi strukturou čtyřiceti různě substituovaných derivátů benzoxazinu a jejich retenčním chováním ve vysokoúčinné kapalinové chromatografii. Poněvadž předkládaná práce splňuje všechny požadavky na diplomové práce kladené, plně ji doporučuji k dalšímu řízení.

V Praze, 15. května 2006

Doc. RNDr. Pavel Coufal, Ph.D.