

Posudek oponenta na diplomovou práci

Autor diplomové práce: Bc. Radka Bušovská

Název diplomové práce: Analýza prchavých látek lidského tělesného pachu pomocí komprehenzivnej dvojdimenzionálnej plynovej chromatografie

Studijní obor: Analytická chemie

Označte křížkem (D je nejhorší A je nejlepší)	D	C	B	A
Úroveň definování cílů práce a kvalita jejich splnění <ul style="list-style-type: none"> ▪ jsou cíle práce jasně formulované a jsou dosažené výsledky vytčeným cílům odpovídající 				A
Originalita práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ přináší původní vědecké výsledky; rozšiřuje současná řešení problému; je variantou známých přístupů; opakuje známá řešení 				A
Přínos práce pro analytickou chemii <ul style="list-style-type: none"> ▪ přináší zcela novou metodiku; výrazně vylepšuje dosavadní analytické postupy; je určitou variantou používaných analytických postupů; využívá standardních analytických metodik a postupů pro řešení problémů z jiných oborů 			B	
Forma členění práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ vhodnost členění na kapitoly, vyváženost rozsahu jednotlivých kapitol, přiměřenost počtu obrázků a tabulek 				A
Zpracování úvodu k řešené problematice <ul style="list-style-type: none"> ▪ informační bohatost úvodních kapitol, relevantnost a úplnost citované literatury 				A
Zpracování experimentální části práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ kvalita a úplnost popisu použitých materiálů a metodik 			B	
Zpracování výsledků práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ způsob zpracování experimentálních výsledků, jejich logické uspořádání a vysvětlení, kvalita dokumentace presentovaných závěrů 				A
Jazyk a stylistická úroveň práce				A
Formální provedení práce <ul style="list-style-type: none"> ▪ tiskové chyby, forma provedení obrazové a tabulkové dokumentace, dodržování konvencí psaní symbolů veličin, jednotek atp. 				A
Celkové zhodnocení práce, A–D <ul style="list-style-type: none"> ▪ mělo by akcentovat obecně přístup studenta k řešení a zpracování zadané problematiky 				A

K předložené diplomové práci mám následující připomínky a dotazy:

Autorka předkládá k obhajobě pečlivě vypracovanou diplomovou práci. Zvláště pak úctyhodný je objem práce a úsilí, které musela vyvinout pro optimalizaci metody a následné vyhodnocení obrovského množství dat.

Diplomová práce měla jasně definovaný cíl, který byl splněn, a navíc poskytl, podle mého názoru, velmi zajímavé výsledky z biologického oboru.

Autorka měla možnost pracovat s poměrně rozsáhlým a unikátním souborem lidských vzorků. Metoda GCxGC-MS byla zvolena nepochybně správně, vzhledem k předpokládané komplexitě vzorků. Výsledek statistického vyhodnocení konečných dat naznačuje, že postupy odběru a zpracování vzorků, přes

optimalizaci chemické analýzy metodou GCxGC-MS, až po zkompletování metabolických dat, byly zvoleny správně. Jsem přesvědčen, že výsledky této práce si zaslouží publikování v impaktovaném periodiku.

Práce obsahuje několik málo nepřesností, případně nejasných formulací a mám tedy na autorku následující dotazy:

- 1) V jedné z částí o GCxGC, autorka popisuje používané principy převodu látek z primární kolony do sekundární. Není mi jasné, jaký princip modulace autorka myslí pod pojmem „heater-based“, modulace.
- 2) Autorka se věnuje velmi podrobně popisu volby vstupních podmínek pro procesování naměřených dat a popisu fungování příslušných softwarů. Zatímco optimalizaci přípravy vzorku a samotného měření je věnována nepoměrně menší část. Prosím tedy o stručné shrnutí optimalizovaných parametrů v následujících částech:
 - A) Příprava vzorku: Byla testována extrakce i do jiných rozpouštědel než do hexanu? Byla testována délka extrakce, nebo teplota?
 - B) Analýza extraktu GCxGC-MS: Zkoušela jste použití i jiných separačních kolon? Optimalizovala jste průběh teplotního programu?
 - C) Zpracování naměřených dat: Prosím autorku o vysvětlení věty: “Kvantita analytu je vyjadrená ako súčet všetkých plôch píkovej daného analytu, teda jeho objem.”
- 3) Prosím o vysvětlení věty (str. 55, 2. odstavce): “Ak by bola modulačná perióda príliš krátka, nemuselo by dôjsť k dostatočnej separácii jednotlivých analytov v chromatograme a naopak, ak by modulačná perióda trvala veľmi dlho, niektoré výrazné analyty s vysokým m/z by z druhej kolóny vyšli až po uplynutí tejto doby.....” **Není to naopak?**

Poznámka: Autorka uvádí v části 4.6: Identifikácia analytov, že pro identifikaci použili komerční databáze EI hmotnostních spekter a retenčních indexů podle n-alkanů. Do případné budoucí publikace bych doporučoval do výsledné tabulky uvést i procentuální shodu naměřeného spektra se spektrem z databáze, a tabelovaný retenční index pro identifikovanou látku, pokud byla pro použitý typ kolony nalezena.

Práce byla vypracována ve slovenštině, proto si netroufám hodnotit gramatickou správnost. Našel jsem v ní pár překlepů, pro které ale není nutné vytvářet opravný list. Prosím pouze o jednu úpravu do diplomové práce. Přidat citaci [101] (stačí tužkou) za větu v Úvodu, str.10, odstavce 2: “Empirické výskumy však ukazujú, že je to naopak a máme tendenciu si vybrať partnera, ktorého telesný pach je podobný s pachom nášho rodiča opačného pohlavia.”

Předloženou diplomovou práci **doporučuji** k dalšímu řízení.



podpis oponenta

titul, jméno a příjmení oponenta

RNDr. Petr Žáček, PhD

V Praze, dne 27.06.2021