

Oponentský posudek disertační práce

RNDr. Vlastimil Hruška (Přírodovědecká fakulta UK, Praha):

Softwarové prostředky pro optimalizaci základních elektrolytů v elektroforéze

Oponent: RNDr. Václav Kašička, CSc., Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, Praha

Předkládaná disertační práce se zabývá vývojem matematických a softwarových modelů elektromigračních separačních procesů a jejich využitím při testování a optimalizaci základních elektrolytů pro separace ionogenních i neionogenních látek elektromigračními metodami. Jelikož vysokoúčinné elektromigrační metody v kapilárním a čipovém instrumentálním formátu (HPCE) patří k nejintenzivněji studovaným, prudce se rozvíjejícím a již také široce užívaným, vysoce citlivým analytickým metodám, je zřejmé, že téma disertační práce je velmi aktuální a významné.

Disertační práce je založena na úctyhodném souboru deseti článků (sedmi původních prací a tří přehledných článků) publikovaných v prestižních mezinárodních recenzovaných časopisech, Electrophoresis, Journal of Separation Science a LC GC Europe. Z deseti článků je disertant ve čtyřech pracích prvním autorem a ve čtyřech pracích druhým autorem, z čehož vyplývá jeho zásadní přínos k prezentovaným výsledkům. Soubor těchto publikací je v úvodní části disertační práce doplněn stručným rozbohem studované problematiky jako celku a v krátkosti jsou zde prezentovány a komentovány hlavní výsledky jednotlivých publikací, které jsou doloženy vhodně vybranými ilustrativními příklady a obrázky. Oproti zvyklostem chybí v této úvodní části samostatná kapitola věnovaná cílům disertační práce. Ty jsou (tak trochu implicitně) obsaženy v Závěru této úvodní části, který vymezuje obecné téma i dílčí náměty této disertační práce a podíl disertanta na jednotlivých publikacích. Dílčí cíle byly rovněž specifikovány v jednotlivých pracích. Jelikož se jedná o práce již publikované, je zřejmé, že všechny náročné cíle byly úspěšně splněny.

Výsledky disertační práce představují významný a cenný příspěvek k teoretickému popisu elektromigračních procesů. Rozšířené a zdokonalené programy PeakMaster 5 a Simul 5 výrazně zpřesňují popis chování elektrolytových systémů obsahujících multivalentní a amfoterní elektrolyty. Práce výhodně navazuje na předchozí výsledky pracoviště disertanta, na kterém je teorie elektromigračních procesů dlouhodobě studována a jež v této oblasti patří k absolutní světové špičce.

Výsledky přinášejí řadu nových, originálních, lze říci až průlomových poznatků a objevů. Pomocí vytvořených matematických modelů a simulačních programů byly nalezeny nové typy základních elektrolytů, např. tzv. oscilující elektrolyty, které stabilně oscilují s různou frekvencí i amplitudou, a elektrolyty, ve kterých neexistují stacionární injekční zóny a ve kterých tudíž nelze využít dosud často používanou praxi – aplikaci vodní injekční zóny pro měření rychlosti elektroosmotického toku. Hlavním přínosem vypracovaných programů je pak možnost jejich využití pro simulace prakticky významných analytických aplikací, kdy s jejich pomocí lze snáze a rychleji navrhnout vhodné složení elektrolytových systémů a další experimentální podmínky pro dosažení úplného rozlišení dané směsi analytů v minimálním čase. Kladně hodnotím, že autor vyvinuté teoretické modely ve spolupráci s ostatními členy pracovní skupiny experimentálně ověřil a potvrdil tak jejich správnost.

Po formální stránce je disertační práce sepsána pečlivě, přehledně a v pěkné grafické úpravě, v úvodní části i barevně. Příložen je i česky psaný Autoreferát disertační práce a anglické „Summary of PhD. Thesis“.

Připomínky, dotazy a náměty do diskuse:

1. V úvodní části psané česky poněkud nesourodě působí anglické názvy „Figure“ a „Table“ používané jako nadpisy obrázků a tabulek i v textu. Na str. 5 a jinde autor uvádí, že publikované práce jsou číslovány „římskými číslovkami“ místo „římskými číslicemi“. V kopiích publikací jsou neúplně vytištěna jména spoluautorek, např. „uskov“ místo „Zusková“ v publikaci II, „Včel kov“ místo Včeláková, „Loka ov“ místo „Lokajová“ a „Tesařov“ místo „Tesařová“ v publikacích VI a X. Výpadky v tisku jsou i v publikaci VIII.
2. Definice resp. zavedení některých veličin, pojmů a jevů nejsou zcela přesné či úplné. Např. definice elektroforézy v úvodním větě na str. 6, kde je definována jako „separační metoda založená na pohybu nabitých látek v roztoku v elektrickém poli“, není zcela přesná, neboť elektroforéza je založena nejen na pohybu nabitých látek, ale obecně na pohybu nabitých částic, kterými mohou být nejen látky ale i buňky a jiné částice organického i neorganického původu. Roztok by měl být přesněji definován jako kapalný roztok, neboť na pohybu částic v elektrickém poli v plynné fázi je částečně založena i hmotnostní spektrometrie.
3. Disociační konstanty by měly být přesněji definovány jako acidobazické disociační konstanty neboli konstanty acidity, neboť disociační konstanty obecně charakterizují jakoukoli disociaci např. disociaci komplexu na jeho složky nebo disociaci molekul na jejich fragmenty či jednotlivé atomy, apod.
4. Na str. 6 je symbol K_w (pK_w) užít pro „rovnovážnou konstantu vody“, v publikacích je tento symbol užít pro odlišnou veličinu „iontový produkt vody“.
5. Formulaci „složka BGE aktivní při vlnových délkách UV nebo viditelného záření“ (str. 8) by bylo vhodnější nahradit formulací „složka BGE absorbující UV nebo viditelné záření“.
6. Při úvodním popisu jevu „systémový pík“ by bylo vhodné uvést i výstižnější termín pro tento jev, „systémová zóna“, neboť výskyt systémové zóny je podstatou tohoto jevu. Přesně vzato, „systémový pík“ je pouze obrazem systémové zóny na elektroforegramu.
7. Na jakém základě probíhají v programu PeakMaster korekce termodynamických hodnot pK_a a limitních iontových pohyblivostí na konkrétní iontovou sílu a teplotu?
8. Je možné na základě dosavadního studia elektrolytových systémů vyslovit určitá doporučení, jakým složením základních elektrolytů by se měli uživatelé kapilární elektroforézy vyhnout, aby se nedočkaly anomálií typu oscilujících elektrolytů a elektrolytů bez stacionárních injekčních zón?
9. Jaké vidí autor další možnosti ve zdokonalování a rozšiřování matematických modelů elektromigračních separačních procesů a simulačních programů Simul a PeakMaster?

Závěr:

Výsledky disertační práce přinášejí nové cenné poznatky, které významným způsobem rozšiřují znalosti o průběhu elektromigračních separačních procesů, dovolují podstatně zefektivnit optimalizaci elektrolytových systémů pro HPCE separace prakticky významných analytů a mohou najít široké uplatnění v analytické praxi. Autor prokázal hluboké teoretické znalosti zkoumané problematiky a schopnost jejich tvůrčí aplikace. Doporučuji, aby disertační práce RNDr. Vlastimila Hrušky byla přijata k obhajobě a aby se stala základem pro udělení vědecké hodnosti PhD.