



UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE
Přírodovědecká fakulta
Katedra analytické chemie
128 43 Praha 2, Albertov 6, fax. 224 913 538

Posudek školitele diplomové práce pana Vojtěcha Vágnera
Vztahy mezi strukturou a retenčním chováním derivátů benzoxazinu

V rámci magisterského studijního programu Klinická a toxikologická analýza vypracoval pan Vojtěch Vágner v roce 2006 na Katedře analytické chemie UK PřF diplomovou práci s názvem *Vztahy mezi strukturou a retenčním chováním derivátů benzoxazinu*.

V předkládané práci se autor zaměřil na studium molekulových absorpčních spekter v UV oblasti a chromatografického chování čtyřiceti nově syntetizovaných derivátů benzoxazinu s prokázanými antimykobakteriálními vlastnostmi. V první části autor kvalitativně charakterizoval vliv struktury na maxima UV absorpčních spekter benzoxazinů. V druhé části práce naměřil retenční charakteristiky studovaných látek a metodami QSPR našel příslušné korelační rovnice mezi hydrofobními π konstantami resp. hodnotami rozdělovacího koeficientu oktanol-voda a kapacitním faktorem.

Jako školitel mohu konstatovat, že pan Vojtěch Vágner dobře zvládl metodiku spektrometrických a chromatografických experimentů na moderních, počítačem řízených instrumentech. Při vlastní experimentální práci prokázal samostatnost a experimentální zručnost. Naměřená data autor dobře a správně zpracoval, přičemž pronikl i do teoreticky obtížnější problematiky korelací mezi strukturou a vlastnostmi látek.

Vlastní diplomová práce je vhodně sepsána, výsledky jsou uvozeny odpovídající teoretickou částí. Experimentální data jsou presentována vhodnou a přiměřenou formou.

Mohu konstatovat, že předkládaná práce pana Vojtěcha Vágnera splňuje podle mého názoru nároky kladené na diplomové práce na Katedře analytické chemie UK PřF, a proto ji plně **doporučuji** k dalšímu řízení.

Praha, 21. května 2006



RNDr. Karel Nesměrák, Ph.D.