

Posudek oponenta doc. Ing. Jana Fischera, CSc. na diplomovou práci Bc. Alexandry Moldové nazvanou

### **Separace polárních látek v HILIC systémech na modifikovaných a nemodifikovaných kolonách.**

V předložené diplomové práci nás diplomantka Bc. Alexandra Moldová seznamuje na 37 stranách textu (stránky 11 - 47) a v doprovodné přílohové části s problematikou popisu retence polárních látek s využitím HILIC módu separací.

V úvodních kapitolách nastiňuje možnosti popisu retenčního chování látek za podmínek separace v HILIC módu i v RP módu včetně představy tzv. duálního módu separace kombinujícího oba již zmíněné mechanismy. Dále jsou detailně rozebírány stacionární fáze vhodné pro HILIC aplikace a je uvedena představa separačního mechanismu v HILIC systému. V této kapitole jsem našel některé nejasnosti a nepřesnosti uvedené dále.

Ve výsledkové části a v návazné příloze diplomantka poněkud monotónně prezentuje získané výsledky – jedná se hlavně o výsledky proložení experimentálních dat celkem tří skupin polárních látek: fenolických kyselin, flavonoidů a nukleových bází a nukleosidů. Orientace čtenáře v této kapitole, resp. ve spojení s přílohovou částí, je velice obtížná hlavně z důvodu nelogické posloupnosti tabulek ve srovnání s komentářem v textu. V této části dále postrádám ve větší míře vlastní diskuzi a kritický rozbor výsledků, uvedený text je převážně slovním přepisem výsledků uvedených v přílohách.

Na jednu stranu výsledky uvedené v diplomové práci reprezentují velké množství experimentální práce, na druhou stranu však k jejímu celkově lepšímu vyznění schází větší pečlivost v obecné části i lepší prezentace dosažených výsledků.

V práci bych zejména upozornil na následující chyby a nepřesnosti:

- str. 13., věta za rovnicí (7): která již uvedená tříparametrová rovnice selhává?;
- str. 13: rovnice (9) a (10) jsou uvedeny chybně;
- str. 16, 2. odst., 1. věta: HILIC není alternativou k HPLC;
- str. 18, 2. věta v posl. odst.: prosím o upřesnění, které stac. fáze vedou ke zlepšení separací;
- str. 39, 2. odst., 1. věta: z rovnic (6) a (7) nemohou být přímo z retenčních dat (ret. objemy nebo časy) vypočteny retenční faktory;
- tabulky v příloze: proč jsou směrodatné odchylky regresních parametrů uvedeny pouze modelů navržených pro duální mechanismus?
- obr. P11 a P12: chybný popis osy  $y$ ;
- obr. P25 a P26: jak byly identifikovány nalezené látky ve vzorcích čaje? Retenční časy identifikovaných látek se neshodují s analýzami standardů (obr. P22, P23); totéž pro obrázky P29 P30, resp. separace standardů na obr. P27 a P28;
- drobné nejednotnosti v psaní literárních zdrojů (tečky).

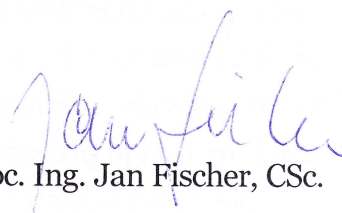
K diskuzi bych měl tyto otázky:

- co si diplomantka myslí o prokládání experimentálních dat uvedenými víceparametrovými závislostmi pro společný popis retence v HILIC i RP-LC oblasti s přihlédnutím k tomu, že byla k dispozici pouze data pro okrajové části závislostí?;
- může diplomantka demonstrovat na primárních datech (chromatogramech) rapidní změny v separační účinnosti pro některé látky v závislosti na změně složení mobilní fáze (např. OH<sub>5</sub> kolona, HILIC mód: kyseliny gallová, syringová a sinapová, naringin, atd.)?

Diplomovou práci doporučuji k obhajobě a s výše uvedeným komentářem ji hodnotím známkou

– velmi dobře-m. –

V Pardubicích, 24. května 2017.

  
doc. Ing. Jan Fischer, CSc.