

Vývoj metody pro analýzu vybraných endokrinních disruptorů pomocí kapalinové chromatografie s hmotnostní spektrometrií

Diplomová práce Bc. Lucie Novotné se zabývá vývojem a optimalizací metody kapalinové chromatografie ve spojení s hmotnostní spektrometrií pro analýzu vybraných endokrinních disruptorů v lidské plazmě.

Teoretická část je velmi dobře zpracovaná a poskytuje komplexní přehled o problematice endokrinních disruptorů, jejich zdrojích, zdravotních rizicích a metodách jejich analýzy. Autorka prokázala dobrou orientaci v literatuře a schopnost kriticky hodnotit dostupné informace. Teoretická část je logicky strukturovaná a přehledná.

V experimentální části se autorka práce zaměřila na optimalizaci separačních podmínek, výběr vhodné kolony a testování různých extrakčních technik. Výsledky jsou prezentovány grafy a tabulkami, které usnadňují jejich interpretaci.

K předložené práci mám následující připomínky:

- Výsledky optimalizace podmínek separace (kapitola 2.6) by měly být uvedeny v kapitole 3 (Výsledky a diskuse).
- V sekci 2.6 je popsána optimalizace gradientu, který byl pak testován na třech typech kolon. Není uvedeno, s jakou kolonou byl původní gradient vytvořen. Myslím si, že toto není vhodný postup. Lepší by bylo optimalizovat gradient pro každou testovanou kolonu, porovnat je na základě vybraných parametrů a následně zvolit tu nejvhodnější kolonu a optimalizovaný gradient pro separaci.
- Str. 48, rovnice (2): v čitateli se odečítá „plocha píku čisté plazmy“. Zde by se měla odečítat hodnota vyjadřující plochu píku v chromatogramu plazmy po provedení SPE.
- Str. 73: tvrzení, že 2. a 3. frakce po SPE obsahuje pouze zanedbatelné množství analytů nekoreluje s grafem 17 (str. 74) v případě bisfenolů. Odhadem z grafu je to ve 2. frakci 25 % a více celkového množství, což není zanedbatelné.
- Str. 83: je konstatováno, že použití vyššího objemu plazmy vedlo k vyšším hodnotám ME s výjimkou DHF. Podle grafu 21 ale i v případě DHF použití vyššího objemu plazmy vedlo k vyšším hodnotám ME.

Dotazy:

- V práci jsou zmíněny hodnoty „log P“ pro každý testovaný analyt. Jak jsou hodnoty tohoto parametru počítány?
- Je nějaké vysvětlení, proč měl 4HB kratší čas eluce než thiomocovina, která byla vybrána jako látka s nulovou retencí ke zjištění mrtvého retenčního času?
- Na str. 83 je diskuse k získaným hodnotám ME. Mohla by autorka upřesnit, co znamená, že došlo k „iontovému zesílení“?

- Na str. 87 je konstatováno, že v ideálním případě by měla být kalibrační řada připravena v roztoku s maticí. Matrice podle všeho byla k dispozici. Byl nějaký důvod, proč nebyla pro přípravu kalibrační řady použita?
- Na str. 87 je dále konstatováno, že hodnoty LOQ jednotlivých analytů představují nejnižší body kalibrační řady. Byla provedena kontrola, zda tyto body vyhovují lineární závislosti, zpětným výpočtem koncentrace nejnižších bodů kalibračních řad z naměřených dat podle rovnice regrese a porovnáním vypočtených hodnot koncentrací s reálnými koncentracemi jednotlivých analytů?
- V experimentální části práce je diskutována teorie kontaminace demineralizované vody některými testovanými parabeny. Bylo by možné to ověřit experimentálně?

Diplomová práce Bc. Lucie Novotné splňuje všechny požadavky kladené na tento typ práce. Autorka prokázala schopnost samostatně pracovat, kriticky hodnotit literaturu a interpretovat experimentální data. Práce je přínosná a může sloužit jako základ pro další výzkum v oblasti analýzy endokrinních disruptorů. Na základě výše uvedených skutečností hodnotím práci známkou

~ B ~

V Pardubicích dne 22. května 2025

doc. Ing. Tomáš Bajer, Ph.D.

Oponent diplomové práce