

Posudek oponenta habilitační práce

Univerzita Karlova
Farmaceutická fakulta v Hradci Králové
Katedra Analytické chemie

Uchazeč: **PharmDr. Petr Chocholouš, Ph.D.**

Obor: Analytická chemie

Habilitační práce: **Vývojové trendy v sekvenční injekční chromatografii**

Předložená habilitační práce „Vývojové trendy v sekvenční injekční chromatografii“ je komentovaným souborem 38 autorských prací zabývajících se vývojem a využitím metody sekvenční injekční chromatografie (SIC). Práce shrnuje výsledky ca. patnáctiletého výzkumu pana PharmDr. Petra Chocholouše, Ph.D. Publikáční výstupy z let 2003-2018 jsou převážně v kvalitních oborových časopisech (Talanta, Anal. Chim Acta, Anal. Bioanal. Chem.), což dokládá především značné odborné zkušenosti autora. U mnoha publikací je Dr. Chocholouš uveden jako první autor, kde předpokládám, že větší díl experimentální práce byl proveden právě jím a autor tak prokázal značnou odbornou erudici a schopnost samostatné vědecké práce. U jiných prací je Dr. Chocholouš uveden jako korespondenční autor – což dokládá mimo jiné jeho schopnosti vést studenty i vědecké pracovníky.

Habilitační práce je uvedena Teoretickou částí, která obsahuje kapitolu Úvod do průtokových metod, ve které autor diskutuje stručnou historii metod FIA, CFA, SIA a vysvětluje základní rozdíl mezi FIA a SIA z hlediska funkce systému a manipulace se vzorkem. Zmiňuje například výhodu SIA, pomocí které lze měnit v průběhu analýzy průtokovou rychlost. Zde na straně 9 úplně nesouhlasím s autorem uváděným vnitřním průměrem kapilár/hadiček používaných ve FIA (údaj: menší než 1 mm), dle mé osobní zkušenosti se používají i větší průměry, na str. 13 naopak autor uvádí rozměry 0.5-1.5 mm. V další části se autor věnuje sekvenční injekční chromatografii, což je v podstatě technika využívající průtokového systému se zapojením jednoduché, obvykle monolitické kolony, pro zvýšení selektivity na základě separace látek na této koloně. V této části jsou také diskutovány různé druhy použitých pump a ventilů, detekce a zpracování dat. Hodnotím kritické srovnání jednotlivých pump z hlediska použitelného tlaku. Velká část je dále věnována chromatografickým kolonám, dávkování vzorku a on-line spojení extrakce se separací. Třetí kapitola - Kapalinová chromatografie – je dle mého názoru poněkud nekonzistentní s tematikou práce, týkající se SIC. Dle mého názoru mohla být tato kapitola a relevantní publikace z habilitační práce vypuštěny, přestože se jedná o kvalitní vědecké práce. Další, již relevantní kapitoly se týkají metod předúpravy vzorků pomocí extrakce na tuhou fázi a extrakce kapalina-kapalina. Jako jednu z hlavních výhod SIC v porovnání s HPLC vidím možnost předúpravy vzorků on-line před vlastní analýzou. Z textu na str 29-31 ale vyplývá, že se toto podařilo pouze pro SPE, zatímco I-I extrakce nenašla v SIC praktické využití – lépe řečeno – nepodařilo se najít vhodné řešení pro online I-I extrakci před SIC. Práce je ukončena komentáři k publikacím a krátkým závěrem.

Přestože z autorových závěrů vyplývá, že použití SIC je poměrně omezené a že původní naděje, které byly do této metodiky vkládány se úplně nenaplnily, představuje SIC zajímavou alternativu oproti HPLC, zvláště za použití monolitických kolon a později také povrchově porézních kolon. Pro jednodušší analýzy, u kterých je potřeba oddělit pouze omezený počet látek, by mohla metoda SIC být levnější alternativou k HPLC. Zajímavé je zejména možné on-line spojení předúpravy a zakoncentrování vzorků a vlastní analýzy. Dle mého názoru práce splňuje všechny požadavky a doporučuji, aby byla přijata k habilitačnímu řízení v oboru analytická chemie.

Univerzita Karlova	6451
Přijato: 21.05.2019 v 09:27:42	Odbor
Č.j.: UKFaF/133123/2019	Zprac.
Č.dop.:	
Listů: 1 Příloh: 0	
Druh: písemné	



K práci mám následující poznámky a dotazy:

Drobné poznámky:

Uváděné impaktní faktory publikací by se měly vztahovat vždy k roku kdy daná publikace vyšla, je poněkud zavádějící uvádět IF z roku 2017 k publikaci která vyšla v roce 2003, tj před 14 lety.

Str.8, druhý řádek : sekvenční injekční chromatografie „(Sequential Injection Analysis – SIC)“ by mělo správně být „(Sequential Injection Chromatography – SIC)“

Práce obsahuje také některé pravopisné chyby:

Str. 23, ř 3. „skupiny rozšířili“ správně „skupiny rozšířily“

Str. 60, ř.5 „výrobci deklarovaly“ správně „výrobci deklarovali“

Str. 60 „vyplívající“ správně „vyplývající“

Dotazy oponenta k obhajobě habilitační práce

1. V mnoha publikacích, zejména u publikací s využitím monolitických kolon lze pozorovat výrazné chvostování píků, např. publikace 3, 4, 14. Je chvostování způsobeno použitou kolonou/mobilní fází, nebo zde také hraje role rozmytí v SIC systému (v porovnání s HPLC) ?
2. Jak vychází srovnání počtu teoretických pater (N) u monolitických a povrchově porézních částicových kolon ?
3. Je popiska u obrázku č. 3 v publikaci č. 24 správná ? Pokud ano, jak autor vysvětluje, že píky odpovídající koncentraci 20 μM Cu(II) a Zn(II) jsou nižší než píky odpovídající koncentraci 10 μM Cu(II) a Zn(II) ?
4. Str. 21. Jaká je cena pumpy neMESYS 1000N ve srovnání s chromatografickými vysokotlakými pumpami s podobnou funkcí ?
5. Str. 25. U chromatografických metod na rozdíl od FIA/SIA používáme vyhodnocení ploch píků. Autor uvádí, že výška píku je vzhledem k ostatním vlastnostem SIC separace dostatečná – je tomu skutečně tak ?

Závěr

Habilitační práce PharmDr. Petra Chocholouše „Vývojové trendy v sekvenční injekční chromatografii“ **splňuje** požadavky standardně kladené na habilitační práce v oboru Analytická chemie. Doporučuji, aby byla přijata jako podklad habilitačního řízení.

V Brně dne 14.5.2019



Doc. RNDr. Petr Kubáň, Ph.D.