

Posudek habilitační práce

Název: Vývojové trendy v sekvenční injekční chromatografii

Autor: PharmDr. Petr Chocholouš, Ph.D.

Oponent: doc. PharmDr. Radim Kučera, Ph.D.

Předložená habilitační práce je komentovaným souborem třiceti osmi publikací PharmDr. Petra Chocholouše, Ph.D., které se převážně věnují oblasti jeho výzkumného zájmu – tzn. spojení průtokových metod s chromatografií. Všechny publikace vyšly v impaktovaných časopisech se zaměřením zejména na separační metody, farmaceutickou analýzu, environmentální analýzu apod. (Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, Talanta, Analytica Chimica Acta, Analytical and Biomedical Chromatography, Journal of Separation Science, etc.). Autorský podíl doktora Chocholouše na těchto publikacích zahrnuje jak experimentální práci, tak i přípravu manuskriptu. Celkem je dr. Chocholouš desetkrát prvním autorem a čtyřikrát korespondujícím autorem. Všechny experimentální práce prošly náročným recenzním řízením a o jejich kvalitě se z tohoto pohledu nedá pochybovat. Většina prací byla uveřejněna v časopisech spadajících do Q1 a Q2. Cílem tohoto posudku tedy není jednotlivé práce opětovně detailně rozebírat.

Habilitační práce přináší přehled vývoje průtokových metod, kdy jednu vývojovou linii v těchto metodách tvoří zapojení separační kolony do systému pro sekvenční injekční analýzu. Tato nová metoda - sekvenční injekční chromatografie (SIC) rozšiřuje využitelnost průtokových metod i na komplikovanější vzorky, které by bez separačního kroku nešlo ve standardním systému analyzovat. Autor se zaměřil i na vývoj příslušného HW a SW. Nejnovější komerční zařízení pro SIC bylo vyrobeno ve spolupráci s Katedrou analytické chemie FaF UK, kde dr. Chocholouš působí. Dále je pozornost věnována i oblasti přípravy vzorku před analýzou, kterou lze provést v průtokovém systému. Přínos práce dr. Chocholouše v autorském kolektivu byl dle mého názoru zásadní. Díky svým znalostem, které uplatnil při testování SIC systému, byla vyvinuta celá řada metod s potenciálním využitím nejen v oblasti farmaceutické analýzy. Předložená habilitační práce dokládá autorovu teoretickou i experimentální erudici a informuje přehledně o vědeckém zájmu kandidáta. Publikovanými pracemi dr. Chocholouš dokazuje svoji schopnost efektivní vědecké práce i v širším kolektivu, který přináší nové poznatky týkající se především SIC, HPLC, úpravy vzorku před analýzou, využití selektivních kroků v průtokové analýze a využití různých detekčních technik. Všechny práce zahrnuté v předložené habilitační práci považuji za velmi kvalitní. Vědecký záběr a znalosti kandidáta jsou bezesporu výborným základem pro jeho další vědecko-pedagogické působení.

Práce svým rozsahem odpovídá pracím svého druhu. Po formální stránce je habilitační práce sepsána jen s několika málo překlepy, místy jsou použity zbytečně dlouhé věty, kdy čtenář postupně ztrácí souvislosti. Některé formulace nejsou zcela přesné (hmotnostní spektrometrie – ideální detektor; acetonitril, methanol – jsou v práci označeny jako nepolární i jako polární rozpouštědla; názvy látek by měly být uváděny INN názvy – paracetamol místo Paralen, účinnost kolony a zdánlivý počet teoretických pater se jeví jako dva odlišné parametry, apod.). Autor se nevyhnul i řadě anglicismů (např. těsně pakované částice, tato varianta trpí vznikem bublin, etc.). Některé formulace se z pohledu chromatografie zdají být nepatřičné, ale je třeba k nim přistoupit z pohledu uživatelů klasických průtokových systémů, kteří z chromatografií nemají zkušenosti (např. upozornění, že pro přípravu mobilní fáze je třeba používat vysoce čistá rozpouštědla, aby nedošlo k degradaci kolony částicemi při použití méně kvalitních rozpouštědel než je HPLC kvalita). Jako celek je práce relativně přehledná, jednotlivé kapitoly popisují minulost i současný stav SIC s výhledem do budoucna. Na druhé straně v komentáři k jednotlivým pracím bych čekal místo položkového výčtu jednotlivých prací spíše porovnání dosažených výsledků a vyvození obecnějších závěrů např. směrem k ideálnímu nastavení systému, jeho využitelnosti v laboratorní praxi, apod.

Na základě úvodu a autorova komentáře k dosaženým výsledkům bych rád poprosil v rámci diskuse o odpovědi na následující dotazy:

- V čem vidíte hlavní význam SIC systémů a jejich přínos k existující instrumentaci? Jaký technologický pokrok by významně posunul vývoj SIC instrumentu kupředu? Jak si cenově stojí nejmodernější SIC přístroj v porovnání s klasickým HPLC systémem?
- Proč považujete HPLC chromatograf nepoměrně náročnější na ovládání? Jak je myšlena formulace: „HPLC přístroj neumožňuje bezprostřední sledování vlivu jednotlivých parametrů metody na výsledek separace“?
- V čem spočívá podle Vás přínos SIC ve výuce chromatografie?
- Proč nelze při zpracování dat použít standardní separační parametry? Jak se sekundárně využívá MS Excel? Jaká data slouží jako vstup?
- Na str. 33 uvádíte, že podle většiny autorit je považována za standardní kolonu 150 × 4,6 mm, plněná částicovým silikagelem o zrnitosti 5 μm s náplní C18, nenašel jsem zde žádný odkaz, a proto bych Vás rád poprosil o komentář k tomuto tvrzení.

Svoje stanovisko k předložené habilitační práci mohu shrnout do následujících bodů:

- habilitační práce nesporně splňuje formální kritéria kladená na tento typ prací,
- spojení separační kolony se systémem SIA rozšiřuje možnosti této metody a může v jistých případech najít své uplatnění, jak dokládají publikované práce,
- výsledky prezentované v habilitační práci jsou původní a dozajista poslouží jako východiska pro další práce zaměřené na tuto oblast.

Vzhledem k výše řečenému mohu habilitační práci PharmDr. Petra Chocholouše, Ph.D. s názvem Vývojové trendy v sekvenční injekční chromatografii **doporučit** k obhajobě.

V Hradci Králové, dne 30. dubna 2019

doc. PharmDr. Radim Kučera, Ph.D.

Univerzita Karlova

Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy

Heyrovského 1203

50005 Hradec Králové