

**UNIVERZITA KARLOVA
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ**

Katedra analytické chemie

Studijní program: Farmacie

Posudek oponenta diplomové práce

Rok obhajoby: 2024

Autor/ka práce: **Filip Bařinka**

Vedoucí práce: PharmDr. Pavel Jáč, Ph.D.

Konzultant/ka: Mgr. Dmytro Kosolapov

Oponent/ka: RNDr. Ondřej Horáček, Ph.D.

Název práce: **Optimalizace vybraných parametrů CE-MS metody pro analýzu doplňků stravy s obsahem boswellových kyselin**

Rozsah práce: 91 stran, 29 obrázků, 11 tabulek, 37 citací

Hodnocení práce:

- | | |
|--|-------------|
| a) Odborná úroveň a zpracování teoretické části: | výborná |
| b) Náročnost použitých metod: | výborná |
| c) Zpracování metodické části (přehlednost, srozumitelnost): | výborné |
| d) Kvalita získaných experimentálních dat: | výborná |
| e) Zpracování výsledků (přehlednost, srozumitelnost): | velmi dobré |
| f) Hodnocení výsledků včetně statistické analýzy: | výborné |
| g) Myšlenková úroveň a rozsah diskuse výsledků: | velmi dobrá |
| h) Srozumitelnost, výstižnost a adekvátnost závěrů: | výborná |
| i) Splnění cílů práce: | výborné |
| j) Množství a aktuálnost literárních odkazů: | výborné |
| k) Jazyková úroveň (stylistická a gramatická úroveň): | velmi dobrá |
| l) Formální úroveň práce (členění textu, grafické zpracování): | velmi dobrá |

Doporučuji diplomovou práci k uznání jako práci rigorózní

Případné poznámky k hodnocení:

Filip Bařinka vypracoval svou diplomovou práci na Katedře analytické chemie pod vedením dr. Pavla Jáče. Cílem práce byla optimalizace parametrů iontového zdroje pomocí DoE, optimalizace složení přídavné kapaliny a optimalizace dávkování vzorku a extrakce analytů dříve vyvinuté CE-MS metody pro 6 boswellových kyselin a 13 nesteroidních antiflogistik. Sledovanými proměnnými byly A/t, S/N a opakovatelnost těchto proměnných vyjádřená pomocí RSD. Optimalizovaná metoda byla použita na předběžnou analýzu 3 různých doplňků stravy obsahujících boswellové kyseliny.

Z hlediska formální úrovně práce jsem pozoroval malé množství překlepů, např. standartní má být standardní, bylo připraveno 7 roztoků má být 6 roztoků. Zřídka se vyskytují nejednoznačné termíny, např. apod. Co se týče popisu testovaných parametrů iontového zdroje, bylo by dobré používat pouze jednu formu jeho popisu, buď zkratku, nebo plný název. Obrázky a tabulky jsou velmi informativní a na velmi dobré grafické úrovni. Na obrázky 9, 10, 18 a tabulku 11 chybí odkaz v textu. Obrázky 11, 12, 13, 14, 15, 16 a 17 jsou složité čitelné, protože dochází ke kombinaci českého titulku obrázku a anglických popisků přímo v obrázku. U obrázků 27, 28 a 29 by měl být u chromatogramů zvolen takový posun na ose y, aby se

nepřekrývaly a byly lépe čitelné. Za některými obrázky či tabulkami jsou v práci zbytečná prázdná místa, což narušuje tok textu a zároveň zbytečně celou práci prodlužuje.

Teoretická část diplomové práce je sepsána přehledně a stručně bez faktických chyb. Experimentální část práce je velmi podrobně zpracovaná. V části výsledky a diskuze jsou rozebrány výsledky všech provedených experimentů. Oceňuji snahu o vysvětlení pozorovaných jevů pomocí dostupné odborné literatury, viz vliv tlaku nebulizačního plynu na migrační čas analytů. V práci mi naopak chybí porovnání A/t a S/N optimalizované metody a metody původní pomocí grafu či tabulky. Citované reference jsou ve všech případech vhodně použity a jsou uvedeny v jednotném stylu. U formátování referencí bych preferoval zarovnání do bloku. Dále bych se vyvaroval citování celých knih, ale použil bych rozsah stran.

V rámci hodnocení podobnosti Theses našel 17 podobných dokumentů. Nicméně podobnost u všech dokumentů je maximálně 3%. Turnitin uvádí celkovou 10% podobnost, ale u všech dokumentů krom jednoho (2%), jde o podobnost do 1%. Všechny nalezené shody se týkají zejména podobnosti v obecných ustálených formulacích, seznamu zkratk a citacích. Je tedy zřejmé, že je původním autorským dílem Filipa Bařinky, proto práci doporučuji k obhajobě.

Dotazy a připomínky:

- 1) Odkud jste čerpal strukturu piroxikamu v příloze 8.1? Bude uvedený izomer piroxikamu nejstabilnější možný?
- 2) Proč jste si u některých obrázků zvolili na ose x místo názvu analytů jejich kvantitativní SRM přechody a u jiných obrázků názvy analytů?
- 3) Jakým způsobem byl stanoven rozsah šumu (h)? Není možné, že nižší opakovatelnost S/N oproti A/t je způsobena právě variabilitou (h)?
- 4) Proč byla nejnižší hodnota tlaku nebulizačního plynu 6 psi? Nemůže změna tlaku nebulizačního plynu změnit nároky na ostatní parametry iontového zdroje?
- 5) Podle čeho jste se rozhodovali, zda-li efekty jednotlivých parametrů budete hodnotit v TIC, nebo v jednotlivých SRM?
- 6) Píšete, že se studovalo nastavení parametrů iontového zdroje pro 17 analytů. Analytů ale bylo 19, jak je tedy možné, že se nakonec studovalo pouze 32 odezev?
- 7) Jaký je přesně rozdíl mezi nízkotlakou a vysokotlakou iontovou nálevkou? Je tento rozdíl důvodem, proč byl na obou nálevkách jiný rozsah optimalizovaných napětí?
- 8) V závěru uvádíte (mělo by být uvedeno dříve), že metoda není schopna rozdělit alfa- a beta- boswellové kyseliny. Do budoucna si za cíl kladete separaci těchto izomerů v CE. Přemýšleli jste už o možnostech, jak toho dosáhnout?

hodnocení, práce je: výborná

k obhajobě: doporučuji

V Hradci Králové

13. září 2024

podpis oponenta/ky