

Posudok habilitačnej práce

Autorka: RNDr. Květa Kalíková, Ph.D.
Názov: Mechanizmus separace a aplikační potenciál chromatografických separačních systémů
Oponent: prof.RNDr. Milan Hutta, CSc.

Predložená habilitačná práca predstavuje na 31 stranách textu a 5 obrázkoch komentovaný ucelený súbor 11 vybraných vedeckých prác, z toho 4 sú v prvoautorstve, publikovaných habilitantkou v renomovaných časopisoch s vysokými hodnotami impakt faktorov. Precízne a prehľadné spracovanie predloženej práce svedčí o dôkladnosti habilitantky, výsledkom čoho je minimum formálnych chýb a jasná koncepcia práce.

Väčšina prác zahrnutých do habilitačnej práce prešla recenzným procesom, preto sa vyjadrim hlavne k úvodnému textu a priloženým publikovaným materiálom habilitantky.

Význam dosiahnutých výsledkov z hľadiska ich vedeckého prínosu pre rozvoj vedného odboru a pôvodnosti:

Význam dosiahnutých výsledkov v predmetnej oblasti hodnotím ako vysoký, čo potvrdzuje aj vysoký celkový počet citácií 204 (Scopus) na 40 vedeckých prác habilitantky, bez autocitácií a za roky 2006 až 2017 s pomerne rôznorodými afiliáciami citujúcich vedcov, čo svedčí o širokom záujme o práce habilitantky a ich hodnote. Prínos vidím vo využití publikovaných poznatkov popri fyzikálnej chémii hlavne v oblasti analytickej chémie a vied o separáciách a tiež v ich priamej aplikovateľnosti v praxi.

Aktuálnosť problematiky obsahu habilitačnej práce:

Problematika fyzikálno-chemického štúdia a objasňovania mechanizmov separácie v HPLC a SFC je vysoko aktuálna a pozitívne hodnotím dosiahnuté výsledky habilitantky. Aktuálnosť jej práce vyplýva aj z možností okamžitého praktického analytického, preparatívneho a priemyslového využitia získaných poznatkov a cez efektívnu optimalizáciu separácie v LC a SFC aj potenciálnu úsporu nemalých prostriedkov. Predložených 11 vedeckých prác habilitantky (2011-2016) je citovaných 110 krát bez autocitácií, čo hovorí o aktuálnosti študovanej problematiky a vedeckej výkonnosti habilitantky (dokument h index 8, na predloženej práci 11) samo za seba.

Zvolené vedecké metódy spracovania témy:

Všetky publikované práce riešia vysoko aktuálnu problematiku prostriedkami a prístupmi vedeckej práce zodpovedajúcimi súčasným moderným trendom, od využitia modernej techniky v analytických separáciách v kvapalinách a superkritických médiách až po pokrokové počítačové techniky spracovania, modelovania a interpretácie výsledkov. Výber študovaných analytov a SF vrátane CSF zodpovedá potrebám súčasnosti a zvlášť pozitívne hodnotím skutočnosť, že popri chirálnych liečivách sa habilitantka sústredila aj na riešenie problémov štúdia nových cyklofruktánových a iných SF.

K úvodnej a sumarizujúcej časti habilitačnej práce mám nasledujúce pripomienky a námety do diskusie v habilitačnej rozprave:

Str. 10. Majú vo Westovej rovnici pridané 2 deskriptory – globularita (g) a flexibilita (F) nejaký vzťah ku gyračnému polomeru (radius of gyration), popisujúcemu hlavne správanie sa makromolekúl (asi kvôli možnosti ich experimentálneho stanovenia), alebo hydrodynamickému polomeru molekúl (analytov) alebo väčších molekúl (viazané funkčné skupiny), rozmeru a tvaru pórov stacionárnej fázy?

Str. 12. Časť vety "...s klesajúcim množstvom ACN v MF." Nebolo by správnejšie uvádzať s klesajúcou koncentráciou ACN v MF?

Str.14. Aké metódy sa najčastejšie využívajú na stanovenie hodnoty objemu stacionárnej fázy V_s pri vami študovaných separačných systémoch HPLC (NP, RP, HILIC) a SFC?

Str. 18 a iné: Má podľa Vás význam aj štúdium separačnej selektivity CSF pre nechirálné látky? Môže take štúdium prispieť k pochopeniu separačných mechanizmov v LC a SFC? V akých prípadoch a aplikáciách?

Str.21 a iné: Aké maximálne koncentrácie modifikátorov v CO₂ je možné využívať bez porušenia superkritického stavu mobilnej fázy za bežných operačných podmienok? Čo je obyčajne príznakom alebo signálom porušenia superkritických separačných podmienok v SFC?

Vzhľadom na skutočnosť, že k žiadosti o vypracovanie oponentského posudku na predloženú habilitačnú prácu RNDr. Květy Kalíkové, Ph.D., nebol priložený návrh minimálnych kritérií na habilitáciu docentov na Prírodovedeckej fakulte Univerzity Karlovej v Prahe, ani zoznam jej pedagogickej činnosti a účasti na konferenciách, zoznam vedených a riešených projektov, predpokladám že kvantitatívne ukazovatele boli splnené v plnom akceptovanom rozsahu.

Kvalitatívnu stránku predložených vedeckých prác RNDr. Květy Kalíkové, Ph.D., ich vedeckú odbornú úroveň a ohlasy na ne hodnotím vysoko kladne.

Záverom konštatujem, že RNDr. Květa Kalíková, Ph.D. spĺňa požiadavky pre úspešné habilitačné pokračovanie pre odbor Fyzikální chemie a odporúčam Vedeckej rade Prírodovedeckej fakulty Univerzity Karlovej v Prahe v súlade s platnou vyhláškou menovať RNDr. Květu Kalíkovou, Ph.D. d o c e n t k o u v odbore Fyzikální chemie.

V Bratislave 8.12.2017

prof. RNDr. Milan Hutta, CSc.

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE
Prírodovedecká fakulta
Katedra analytickej chémie
Mlynská dolina, Ilkovičova 6
842 15 Bratislava - 2 -

vedúci katedry,
garant habilitačného a inaug. konania v odbore Analytická chémia
Katedra analytickej chémie, Prírodovedecká fakulta,
Univerzita Komenského v Bratislave