



Prof. RNDr. Věra Pacáková, CSc.
Univerzita Karlova
Přírodovědecká fakulta
Katedra analytické chemie
ALBERTOV 2030, 128 40 Praha 2, ČR
tel. + fax +420224913538, pacakova@natur.cuni.cz
V Praze dne 28.11.2017

OPONENTSKÝ POSUDEK

habilitační práce RNDr. Květy Kalíkové, PhD.

Mechanismus separace a aplikační potenciál chromatografických separačních systémů

Předložená habilitační práce představuje soubor 11 příložených publikací, kterým předchází krátký, ale výstižný úvod do problematiky, následovaný diskusí dosažených výsledků a závěrem. Vybrané publikace uvedené v habilitační práci jsou zaměřené na objasnění mechanismu separace v různých módech vysokoúčinné kapalinové chromatografie a superkritické fluidní chromatografie. K popisu mechanismu separace v hydrofilních interakčních chromatografických systémech byly použity různé přístupy, jako jsou závislosti popisující adsorpci analytu na povrch stacionární fáze a rozdělování analytu mezi vodnou vrstvu sorbovanou na povrch stacionární fáze a mobilní fázi, model lineárních vztahů volných energií a popis iontových interakcí a selektivity pro různé funkční skupiny ve struktuře analytů. Podrobně byl studován retenční mechanismus stacionárních fází na bázi cyklofruktanu a derivatizovaných polysacharidů. Byla zjištěna komplementární enantioselektivita daná strukturou polysacharidového skeletu, derivatizační skupinou i použitým chromatografickým módem. Enantioselektivní potenciál polysacharidových kolon byl studován i za podmínek SFC. Bylo navrženo vhodné složení mobilní fáze pro rychlé a účinné analýzy různých skupin biologicky aktivních látek. Na základě provedených studií bylo možné učinit zobecňující závěry.

Jak sama autorka uvádí, neexistuje univerzální postup pro optimalizaci chromatografických separačních podmínek, zejména pro komplexní směsi a rozlišení enantiomérů, a tímto směrem se jistě zaměří její další výzkum.

Téma práce je velmi aktuální a poskytuje mnoho témat k dalšímu výzkumu.

Habilitační práce je zpracována pečlivě a po odborné stránce k ní nemám námítky. Výsledky byly publikovány ve významných chromatografických časopisech, kde prošly náročným recenzním řízením. Práce je logicky členěna, výsledky jsou správně interpretovány. Po formální stránce rovněž není co práci vytknout.

Dotazy do diskuze:

Str. 5, rovnice (1): Jak se určí A_S (plocha na povrchu stacionární fáze obsazena molekulami analytu) a n^B (plocha na povrchu stacionární fáze obsazena molekulami rozpouštědla)?

Domníváte se, že v budoucnosti budou zavedeny nové deskriptory, které výstižněji popíší chování chirálních látek?

Je možné obdobné vztahy aplikovat na kapilární elektroforézu?

Závěrem lze shrnout, že výsledky předkládané habilitační práce představují významný příspěvek k pochopení separačních dějů v kapalinové a superkritické chromatografii a mají reálné uplatnění v praxi, zejména při analýze chirálních léčiv.

Jsem přesvědčena, že habilitační práce RNDr. Květy Kalíkové, PhD může být podkladem pro její habilitaci na docentku pro obor fyzikální chemie. Její přijetí a kladné zhodnocení habilitační komisí d o p o r u č u j i.