



Přírodovědecká
fakulta
Faculty
of Science

Jihočeská univerzita
v Českých Budějovicích
University of South Bohemia
in České Budějovice

POSUDEK OPONENTA NA BAKALÁŘSKOU/~~DIPLOMOVOU~~* PRÁCI

Autor práce: Adéla Veselá

Název práce: Vývoj metody pro stanovení vybraných aromatických aminů pomocí LC/MS

Školitel práce: Ing. Pavla Fojtíková, Ph.D.

Oponent práce: Mgr. Karel Hořejší

Pracoviště opONENTA: Katedra chemie, Přírodovědecká fakulta
Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích

Komentář opONENTA:

Předložená bakalářská práce se zabývá vývojem analytické metody pro stanovení vybraných aromatických aminů v cigaretových nedopalcích za pomoci metody LC/MS.

Literární rešerše stručně charakterizuje aromatické aminy a další látky nacházející se v cigaretovém kouři, jejich využití a shrnuje negativní dopady na životní prostředí a lidské zdraví, které by však mohly být v práci více diskutovány. Část rešerše se rovněž věnuje popisu kapalinové chromatografie s hmotnostní detekcí, účelem optimalizace a možnostmi stanovení aromatických aminů zahrnující přípravu vzorků. Literární rešerše je zpracována kvalitně, s minimem chyb a překlepů. Celkem je zde uvedeno 39 citací, přičemž zdroje jsou vhodně zvolené a aktuální. V seznamu citovaných zdrojů však často chybí některé údaje jako ISBN, edice, číslo svazku a vydání či počet stran. Názvy časopisů nejsou sjednoceny. Rovněž některé zkratky nejsou v textu definovány a uvedeny v seznamu zkratk.

Experimentální část bakalářské práce je zaměřena na optimalizaci podmínek chromatografické separace a hmotnostní detekce, včetně následné validace vyvinuté analytické metody v odpovídajícím rozsahu. Dále se věnuje extrakci studovaných analytů ze vzorků nedopalků a jejich následné analýze pomocí vyvinuté metody. Naměřená data jsou přehledně a srozumitelně interpretována, objektivně zhodnocena a zjištěné výsledky spolu s vyvozenými závěry jsou diskutovány a porovnány s dříve publikovanými daty. Jako drobný nedostatek spatřuji absenci širšího obrazového zpracování výsledků, zejména pak v kapitolách týkajících se optimalizace LC/MS podmínek (např. chromatogramy, hmotnostní spektra, grafy apod.).

Ačkoli studované analyty nebyly v extraktech z nedopalků v rámci práce detekovány, samotný postup při vlastní experimentální práci byl systematický a vhodně zvolen. Autorka navíc v závěru uvádí možné příčiny, které zřejmě zamezily detekci studovaných analytů, včetně návrhu řešení v podobě optimalizace postupu extrakce či použití SPE k přečištění extraktů s ohledem na pravděpodobný rušivý vliv matrice vzorku.

Práce má logickou strukturu a rozsah jednotlivých částí je vyvážený. Cíle jsou v úvodu jasně definovány a byly naplněny. Z práce je zjevné, že jejímu zpracování bylo věnováno dostatečné množství času a úsilí, což je doloženo značným množstvím provedených experimentů. Bakalářskou práci autorky celkově hodnotím jako vyhovující požadavkům, které jsou kladeny na kvalifikační práce bakalářského stupně studia. Celkově uděluji 46 ze 48 možných bodů, práci doporučuji k obhajobě a navrhuji známku výborně.

* Nehodící se škrtněte

	Bodový rozsah hodnocení ¹	Body
(1) FORMÁLNÍ POŽADAVKY		
Celkový rozsah práce (pro bakalářské práce min. 18 stran, pro diplomové práce min. 25 stran), vyváženost rozsahů jednotlivých částí, logická struktura práce (u experimentálních prací doporučení pro teoretickou část do 1/3 celkového rozsahu)	0-3	3
Kvalita literární rešerše (počet použitých původních pramenných zdrojů, vhodnost výběru, aktuálnost zdrojů)	0-3	3
Správnost používání citačních odkazů (přítomnost necitovaných údajů, dodržování jednotného stylu citací, používání oficiálních zkratk časopisů)	0-3	2
Grafická úprava textu a obrázků	0-3	3
Úroveň souhrnu/anotace (i v angličtině)	0-3	3
Jazyková a stylistická úroveň, respektování platného názvosloví	0-3	3
Správnost a úplnost popisů u obrázků a tabulek (srozumitelnost bez zřetele k ostatnímu textu, vysvětlení značek, jednotky uváděných veličin)	0-3	3
Formální požadavky – body celkem		20
(2) VĚCNÉ POŽADAVKY		
Splnění cílů práce	0-3	3
Schopnost porozumět výsledkům, jejich interpretace a jasný popis, srozumitelnost diskuze a závěrů	0-3	3
Úroveň diskuse – interpretace výsledků, zařazení do kontextu v literatuře (absence diskuze výsledků s literaturou je nepřijatelná)	0-3	3
Logika postupu při vlastní výzkumné práci	0-3	3
Úplnost popisu použitých metodik	0-3	3
Experimentální náročnost práce, samostatnost při práci	0-3	3
Úroveň zpracování experimentálních dat	0-3	3
Aktuálnost použitých metod	0-3	3
Přínos práce pro obor a publikovatelnost výsledků (po případném doplnění)	0-3	2
Věcné požadavky u experimentálních prací – body celkem		26
(3) PRÁCE V CIZÍM JAZYCE		
Jazyková a stylistická úroveň	0-3	
CELKEM BODŮ (MAX/ZÍSKANÝCH)		
	48/51²	46³

¹ Bodový rozsah hodnocení: 0-nevyhovující, 1-vyhovující, 2-průměrné, 3-excelentní. U teoretických prací hodnotíte jenom (1) Formální požadavky, u experimentálních prací i (2) Věcné požadavky a u prací v cizím jazyce i (3) Jazykovou úroveň práce v cizím jazyce.

² Vyberte jednu z hodnot: 48 bodů pro experimentální práce, 51 bodů pro experimentální práce v cizím jazyce

³ Zadejte počet přidělených bodů.

Připomínky a dotazy, na které má student/-ka reagovat při obhajobě.

- 1) Uvedte prosím, na základě které skutečnosti byla provedena selekce aromatických aminů studovaných v rámci této práci?
- 2) Vysvětlete prosím, z jakého důvodu byl při přípravě mobilní fáze okyselené kyselinou mravenčí vybrán právě octan amonný a ne mravenčan amonný? Zkoušela autorka i kombinaci kyselina mravenčí + mravenčan či kyselina octová + octan?
- 3) Zvažovala jste použití i jiných extrakčních rozpouštědel než MTBE? A případně jaká?
- 4) Vysvětlete prosím, jakým způsobem byla určena mez detekce a mez stanovitelnosti vyvinuté analytické metody?
- 5) V Tab. 12 (str. 27) jsou uvedeny koncentrační rozsahy metody pro jednotlivé analyty. Hodnoty odpovídající nejnižšímu kalibračnímu bodu však neodpovídají hodnotám mezím stanovitelnosti uvedených v Tab. 13 (str. 28), ba naopak, jsou nižší. Definujte prosím mez stanovitelnosti a zdůvodněte tento rozdíl.
- 6) Bylo by možné vzhledem k řádově nižší citlivost metody v porovnání s dříve publikovanými výsledky a vzhledem ke skutečnosti, že v rámci práce nebyly vybrané aromatické aminy ve vzorcích nedopalků detekovány použít k zakoncentrování analytů metodu SPE? Pokud ano, jaké typy stacionární fáze by bylo možné použít?
- 7) Na str. 31 je uvedeno, že v rámci analýzy extraktů nedopalků nebyly detekovány stanovované analyty ani vnitřní standardy, a to ani v případě obohacení vzorků známým množstvím standardů z důvodu pravděpodobného rušivého vlivu matrice. Ověřovala autorka, zda např. filtr, který je součástí matrice vzorku, nesorbuje analyty z extrakčního rozpouštědla?

Chyby, na které si má dávat student v budoucnu pozor:

- 1) **anotace**
 - zde by mělo správně být „The chromatographic conditions **was/were** first optimized“
- 2) **klíčová slova**
 - zde by mělo správně být „**keywords**“, (anglický název se píše vždy dohromady)
- 3) **seznam zkratek**
 - doporučuji v budoucnu uvádět seznam zkratek v abecedním pořadí (kvůli lepší orientaci)
 - v názvu zkratky „2-TOL“ chybí písmeno (tj. 2-tolu**i**din)
- 4) **str. 2, kap. 2.1**
 - zde je uvedeno: „... různé kovy (Al, Fe, **Br**, Mn) ...“, **pravděpodobně zde mělo být „Be“**
- 5) **str. 3, kap. 2.2**
 - je-li explicitně uvedeno „**vysokoúčinná kapalinová chromatografie**“, bylo by vhodnější použít zkratku „**HPLC**“ místo „LC“, zkratka LC/MS navíc není uvedena v seznamu zkratek
 - domnívám se, že zde jsou chybně uvedeny jednotky „<10 **m**mol/l“
- 6) **str. 4, kap. 2.2.2**
 - není definována zkratka „HESI“ vč. uvedení v seznamu zkratek
 - jednotné číslo od slova „ionty“ je „ion**t**“
 - použití termínu molekulový či molekulární ion je chybné (= ion s lichým počtem e⁻ u EI/CI), v případě měkkých ionizačních technik se používá termín (de)proponovaná molekula
- 7) **str. 5, kap. 2.2.2**
 - v česky psaném textu se je vhodnější používat výrazy **S-čočky** a **F-čočky**
- 8) **str. 5, kap. 2.3**
 - není definována zkratka „PFP“ u stacionární fáze vč. uvedení v seznamu zkratek
- 9) **str. 7, kap. 2.4**
 - není definována zkratka „HPLC/MS“ vč. uvedení v seznamu zkratek
- 10) **str. 10 a 11, kap. 3.4.1**
 - Tab. 4 duplikuje informace o složení použitých mobilních fází
- 11) **str. 14 a 15, kap. 3.5**
 - při uvádění gravitačního přetížení by se měl používat **symbol krát „x“ oddělený mezerou**
- 12) **str. 17, kap. 4**
 - vyvarovat se používání termínu „**nejlepší**“ podmínky, vhodnější je použít „**optimální**“
- 13) **str. 18, kap. 4.3**
 - ve výčtu parametrů se zřejmě opakuje dvakrát pojem „symetrie píku“
- 14) **str. 20, kap. 4.4.1**
 - na začátku druhého řádku chybí předložka „**v**“ a ve 2. odstavci má být správně „3,5 **kV**“
- 15) **str. 22, kap. 4.4.3**
 - Podivný název kapitoly „Optimalizace objemu a **“koncentrace” nástřiku** ...“?
- 16) **str. 26, kap. 4.6.1**
 - není definována zkratka „FDA“ vč. uvedení v seznamu zkratek
- 17) **str. 29, kap. 4.6.3**
 - není definována zkratka „AOAC“ vč. uvedení v seznamu zkratek
- 18) **seznam použitých zdrojů**
 - velmi často zde chybí údaje jako ISBN, edice, číslo svazku a vydání, počet stránek (pokud je dokumentu přiděleno DOI, mělo by být v citaci také uvedeno)
 - názvy časopisů nejsou sjednoceny (plný vs. zkrácený název)

Závěr:

Práci

d o p o r u č u j i / ~~n e d o p o r u č u j i~~*

k obhajobě a navrhuji známku VÝBORNĚ.⁴

V Českých Budějovicích dne **2. května 2023**

.....

podpis

⁴ Je možné navrhnout známku s tím, že navržená známka může být upravená při obhajobě (pokud se oponent nezúčastní obhajoby, v posudku navržená známka se do výsledné známky nezapočítává). Znamky: výborně (1), velmi dobře (2), dobře (3), nevyhověl (4).