

Recenzní posudek na diplomovou práci

Autor diplomové práce: Bc. Michal Petreň
Studijní program: N1407 Chemie
Studijní obor: Analytická chemie
Název práce: **Přímá identifikace drog hmotnostní spektrometrií**

Předložená práce pojednává o problematice analýzy vybraných nových syntetických drog s využitím hmotnostní spektrometrie s ionizací elektrosprejem a přímou sondou ASAP a jejího spojení s iontově mobilní separací. Cílem práce bylo získat přehled o fragmentačních procesech studovaných látek, jejich iontově mobilní separaci a ověřit možnosti analýzy vzorků substancí bez úpravy vzorků, popř. screeningu v moči s jednoduchou úpravou vzorku.

Práce v rozsahu 95 stran je členěna na úvod, teoretickou část, experimentální část, výsledky a diskuzi, závěr, seznam literatury, seznam zkratk a přílohy. Obsahuje souhrn v českém i anglickém jazyce. V teoretické části autor přehledně zpracovává problematiku ambientních ionizačních technik se zaměřením na techniky, kterým je věnována pozornost na Katedře analytické chemie PřF UP, věnuje se spojení iontové mobility s hmotnostní spektrometrií, v patřičném rozsahu seznamuje čtenáře s hlavními skupinami nových syntetických drog a s jejich analýzou. Tuto část práce zpracoval Bc. M. Petreň na základě 70 literárních pramenů.

Následuje popis experimentu a kapitola výsledky a diskuze, ve které autor popisuje fragmentační procesy studovaných látek, upozorňuje na některé méně obvyklé neutrální ztráty, přičemž jejich interpretaci opírá o přesné a správné měření hmotnosti. Diskutuje možnosti odlišení analytů pomocí fragmentace resp. iontové mobility. Rozebírá výsledky získané ionizací elektrosprejem a přímou sondou ASAP, demonstruje potenciál těchto technik pro identifikaci substancí zadržených na nelegálním trhu (k dipozici měl dva reálné vzorky). Dále pomocí jednoduchého postupu QuEChERS autor zpracoval dva vzorky moče (s přidavkem vždy jedné sledované látky). Následné analýzy elektrosprejem a spojením hmotnostní spektrometrie s iontovou mobilitou ukázaly, že lze zkoumané látky spolehlivě identifikovat na koncentrační úrovni 0,1 µg/ml moče.

Dosažené výsledky shrnuje autor v závěru, zmiňuje význam naměřených dat pro identifikaci nových syntetických drog, hodnotí použité ionizační techniky i možnosti rychlé analýzy zadržených substancí a potenciál testovaného postupu při průkazu drog v moči,

přičemž poukazuje na výrazné potlačení pozadí ve spektrech při použití iontové mobilitní separace.

K předkládané práci mám následující připomínky:

- K formálním prohrškům patří překlepy či jazykové nebo formulační chyby např.: souhrn - „látek a potenciálně“ má být „látek s potenciálně“; summary – řada překlepů v anglickém textu - „odentification“ má být „identification“, „od protonated“ - „of protonated“, pro čtenáře je zavádějící chyba v údajích „1 µg/ml“ správně „0,1 µg/ml“ aj.; str. 11 – Tabulka I – jde o techniku přímé ionizace nikoli desorpce; str. 18 – nevhodná formulace „zdlouhavý odběr vzorku a jeho úprava“; str. 26 – použito katinony i katinony v textu by to mělo být jednotné; str. 32 - „programovaný teplotní program“ - stačí „teplotní program“; str. 36 – nikoli „průtok zmlžujícího plynu“, ale „tlak zmlžujícího plynu“; str. 36 - „byly sbírány data“ správně „byla sbírána data“; str. 42 i jinde nepřesná formulace „v případě fragmentačního spektra na MS spektrum“; str. 50 – příloha 8 a 9 je na str. 76 a 77; str. 60 – nevhodná formulace „Fragmentační spektrum získané pro fragmentační pík...“ - nešlo o fragmentaci fragmentu; kromě uvedení v seznamu zkratk je vhodné je vysvětlit při prvním výskytu; v seznamu literatury nebyl vždy dodržen formát (zkratky časopisů);
- Str. 9 – výrok „se metoda úspěšně využívá v nádorové diagnostice“ vyznívá příliš optimisticky. Může autor tento výrok okomentovat?
- Str. 14, obr. 3 – nejde o kapiláru, označení proudu dusíku není přesné.
- Str. 15 – jak je myšlena časová náročnost FT-ICR?
- Str. 16, druhý odstavec, třetí řádek – není vhodné používat v této souvislosti termín přesnost.
- Str. 17 – může autor komentovat analýzu biologických zbraní (viz první odstavec)?
- Str. 25 – přehled vybraných fenylethylaminů – opakovaně chybný název u struktury. Vzhledem k významu přehledu pro budoucí čtenáře je nutné dodat k tabulkám erratum (vložit do diplomové práce).

K předkládané práci mám následující náměty k diskusi:

Jak autor hodnotí možnosti ambientních ionizačních technik při kvantifikaci látek?

Jaké jsou možnosti ovlivnění iontové mobilitní separace?

Je třeba zdůraznit, že uvedené formální i další připomínky nesnižují úroveň předkládané diplomové práce. Autor v potřebném rozsahu zpracoval teoretickou část, prokázal tak patřičné znalosti a schopnost práce s literárními zdroji. Spokojenost lze vyjádřit i s jeho experimentální prací. K práci v laboratoři přistupoval zodpovědně, navrhoval a diskutoval možná řešení problémů, které se objevily během experimentální práce, prokázal schopnost samostatné interpretace dat. Bc. Michal Petreň dosáhl zajímavých výsledků, které se mohou stát východiskem pro rychlou metodu identifikace nových syntetických drog, přičemž některé jeho poznatky mají i obecnější využití (např. fragmentace studovaných látek). Stanovené cíle byly splněny a předložená práce přispívá k rozvoji poznatků využitelných při analýze významné skupiny látek, jakými nové syntetické drogy jsou.

Práce ukazuje, že autor zvládl studovanou problematiku po teoretické i praktické stránce v potřebném rozsahu. Na základě výše uvedeného **doporučuji předloženou diplomovou práci k obhajobě.**

V Olomouci 13.5. 2013

prof. RNDr. Karel Lemr, Ph.D.
vedoucí diplomové práce