

Recenzní posudek na diplomovou práci

Název práce: **Iontová pohyblivost s hmotnostní spektrometrií ve forenzní analýze**

Autor práce: Sandra Benická

Recenzent: Volodymyr Pauk, Katedra analytické chemie, 17. listopadu 12, 771 46 Olomouc

Předkládaná práce řeší využití spektrometrie iontové pohyblivosti spojené s hmotnostní spektrometrií ve forenzní vědě. Práce má rozsah 59 stran a je standardně členěna na úvod, teoretickou část, experimentální část, výsledky a diskuze, závěr, seznam literatury a seznam použitých zkratk.

V teoretické části jsou popsány obecné principy různých typů mobilních analyzátorů a uvedeny komerční stroje využívající spojení iontové mobility s hmotnostní detekcí. Samozřejmostí jsou četné příklady aplikace jak samotné iontové mobility tak i spojení IMS-MS v analytické chemii. Autorka věnuje zvláštní pozornost využití dané techniky ve forenzní vědě, zejména při analýze drog, výbušnin, bojových chemických látek a vysoce toxických průmyslových látek.

Praktická část je zaměřena na rychlou analýzu nových syntetických drog pomocí zmíněné techniky. Ve výsledcích a diskuzi je prezentováno srovnání dvou ionizačních zdrojů (elektrospreje a fotoionizace za atmosférického tlaku), srovnání třech driftových plynů (N_2 , CO_2 , Ar), možnosti iontové mobility z hlediska separace izobarických látek a zlepšení citlivosti detekce, a konečně aplikaci vyvinuté metody na modelové vzorky (spikovaná moč). Také byly stanoveny limity detekce a lineární rozsah pro analyzované látky. Objem praktické části je poněkud menší než obvykle, a to z důvodu, že větší část experimentálních dat v podobě obrázků byla přenesena do rozsáhlých příloh umístěných až na 53 stránkách.

V práci se občas objevují drobné chyby a nedostatky:

- v anglickém summary je zmíněn „carbon monoxide“ když se jedná o oxid uhličitý, nikoliv o oxid uhelnatý;
- v textu chybí odkaz na obrázky 1 až 4;
- u zmíněných obrázků by se hodily legendy s popisem součástí IMS analyzátorů;
- obrázky 5 až 9 jsou rozmyté;
- kodein je několikrát napsán jako „codein“ (str. 19);
- pro popis průtokové injekční analýzy FIA se více hodí pojem „nosná kapalina“ nežli použitý autorkou pojem „mobilní fáze“;
- nepřesný překlad parametru „velikost vlny“, má být „výška vlny“;
- několikrát opakující se vysvětlení zkratk (ESI, TOF), stačí jen při první zmínce.

K diskuzi mám následující otázky:

1. V práci tvrdíte, že ESI poskytuje vyšší odezvy než APPI. Nicméně APPI spektra jsou ukázána jen pro tři látky (MABP, MDEC a Pentedron). Zkoušela se fotoionizace pro ostatní látky? Může být nižší intenzita APPI signálů dána tepelnou degradací analytů v důsledku vyšší desolvatační teploty (550 °C oproti 400 °C v ESI)?
2. Při úpravě vzorků se použila centrifugace a filtrace. Proč nestačila jen jedna z metod?
3. Nejhorší meze detekce byly stanoveny u látek CAT, MDA, BDB, 2C-H (0,25 µg/ml). Všechny tyto látky jsou primární aminy. Souvisí to nějak s vyššími hodnotami LOD (méně efektivní ionizace nebo horší fragmentace při zvolené kolizní energii)?
4. V závěru čteme, že jednou z výhod techniky je rychlost analýzy. Jaký byl čas jednotlivé FIA-IMS-MS analýzy?

Lze konstatovat, že v této diplomové práci byly nalezeny jen drobné nedostatky. Autorka zpracovala teoretickou a praktickou část studované problematiky v potřebném rozsahu. Práci **doporučuju** k obhajobě.

V Olomouci 11.5.2015

Mgr. Volodymyr Pauk
recenzent