

Oponentský posudek na diplomovou práci

Název práce: **Přímá identifikace drog hmotnostní spektrometrií**

Autor: **Bc. Michal Petreň**

Vedoucí práce: **prof. RNDr. Karel Lemr, Ph.D.**

Oponent: **doc. RNDr. Petr Bednář, Ph.D.**

Diplomová práce Michala Petreně je zaměřena na analýzu nových syntetických drog (z angl. *new design drugs*) kombinací iontově mobilitní separace s hmotnostní spektrometrií. Pro měření byly využity dva typy iontových zdrojů – elektrosprej a přímá sonda (ASAP). Práce má klasické členění na Úvod, Teoretickou část, Experimentální část, Výsledky a diskusi, Závěr, Literaturu a Seznam použitých zkratk. Je sepsána na 95 stranách, obsahuje 23 obrázků, 13 tabulek, 27 příloh uvádějících MS a MS/MS spektra měřených látek a opírá se o 71 literárních citací.

V teoretické části autor popisuje hmotnostní spektrometrii se zaměřením na ambientní ionizační techniky a využití iontové mobility ve hmotnostní spektrometrii. Detailně diskutuje použití těchto analytických metod pro forenzní výzkum a praxi. Nezbytnou součástí je rovněž kapitola o nových syntetických drogách. Zde se zabývá historií a současností těchto látek, jejich vlastnostmi a mechanismem jejich účinku. Struktura teoretické části je s ohledem na téma diplomové práce dobře navržena. Její rozsah považuji za dostatečný a zaměření jednotlivých kapitol za účelné. Text svědčí o tom, že autor má dobrý přehled přes studovanou problematiku.

Další části textu jsou již věnovány vlastní experimentální práci a získaným výsledkům. Zde autor prezentuje hmotnostně spektrometrická data získaná pro jednotlivé studované látky. Komentuje přesnost a správnost měření m/z hodnot sledovaných iontů, možnost jejich mobilitní separace a mechanismus fragmentace po kolizí indukované disociaci rodičovských iontů. Získaná data jsou prezentována a diskutována velmi pečlivě. Experimentální část působí uceleným a kompaktním dojmem. Působivé je využití iontové mobility pro zvýšení selektivity měření a omezení vlivu matrice na kolizní spektrum nafyronu při jeho detekci ve vzorku moči. Data představují relevantní základ rychlé metodiky pro kontrolu nově syntetizovaných drog v biologických tekutinách.

K práci mám následující otázky a připomínky:

Autor ve své práci využívá při měření přesné a správné hmotnosti iontů korekce na leucin-enkefalin (lock-mass z nezávislého skenu) a u MS/MS spekter rovněž korekce na (nefragmentovaný) rodičovský ion. Může autor na základě teorie i zkušeností z vlastní experimentální práce blíže komentovat výhody a nevýhody obou typů korekce?

K této otázce se váže i drobná připomínka k formulaci na str. 42, druhá věta: „První dvojice spekter obsahuje surová data, druhá dvojice potom obsahuje korigovaná data na leucin-enkefalin – v případě MS spektra resp. v případě fragmentačního spektra na MS spektrum.“ Přesnější by bylo napsat, že v případě MS/MS spektra jde o korekci s využitím teoretické hodnoty m/z rodičovského iontu („zamčení“ spektra na správnou hmotu rodičovského iontu).

Velmi zajímavé je využití přímé sondy ASAP. Autor uvádí, že použití programované změny teploty – předeřtí a vysušení vzorku při 100°C a následné měření při 400°C dovoluje snížit pozadí. Proces odpařování a ionizace látek ze vzorkovací kapiláry jistě závisí na rychlosti

ohřevu na pracovní teplotu, na tloušťce filmu naneseného vzorku a řadě dalších parametrů. Zajímalo by mě, jak je měření robustní a jaké jsou zkušenosti s opakovatelností intenzit rodičovských iontů, fragmentů a případně interferentů.

Místo anglickanismu „*parentní*“ by pro označení iontu $[M+H]^+$ bylo v česky psané práci vhodnější použít označení „*rodičovský*“.

Uvedené připomínky nejsou podstatné.

Předložená diplomová práce Michala Petreně je po obsahové i formální stránce kvalitním dílem a proto ji rád **doporučuji** k obhajobě.

V Olomouci, 10. května 2013

Doc. RNDr. Petr Bednář, Ph.D.

Katedra analytické chemie, PřF UP Olomouc