

Posudek na habilitační práci

Identifikácia a kvantifikácia vybraných chemických látok v komplexných matriciach technikami hmotnostnej spektrometrie

Autorka práce: **RNDr. Andrea Vojs Staňová, PhD.**

Habilitační práce je předložena jako komentovaný soubor patnácti časopiseckých publikací. Věnována je vysoce aktuálnímu tématu, a to hmotnostní spektrometrii v analýze složitých vzorků. Je nutné zdůraznit, že bádání se neomezovalo pouze na hmotnostní spektrometrii, ale stanovených cílů je dosahováno na základě poznání celého analytického procesu od vhodné úpravy vzorku přes vývoj účinné separace po selektivní a citlivou detekci hmotnostní spektrometrií a náležité zpracování dat. Pro úplnost je třeba dodat, že jsou zahrnuty dvě práce, které naopak „obcházejí“ chromatografickou či elektroforetickou separaci využitím ambientní ionizační techniky.

Obsah habilitační práce dokládá široký výzkumný zájem autorky, kdy se věnovala analýze biologických a environmentálních vzorků spojením HPLC-MS, se spoluautory popsala zajímavé využití preparativní izotachofórey (např. pro zlepšení limitů detekce), využila spojení CE-MS, ale také ambientní ionizační techniku LDTD. Byť se jedná, jak již bylo uvedeno, o komentovaný soubor časopiseckých publikací, spojovací text autorka zpracovala velmi pečlivě, kdy v něm cituje 190 prací. Poskytuje čtenáři úvod do studované problematiky a v kontextu současného poznání popisuje výstižně obsah svých připojených publikací. Většina z nich (14 z 15) byla publikována v mezinárodních časopisech s impaktním faktorem. Z těchto 14 je 12 publikováno v časopisech v Q1, 2 v Q2. Publikované práce musely projít náročným recenzním řízením, což dokládá jejich odbornou úroveň. Následující komentáře a dotazy nikterak nesnižují úroveň publikací a habilitační práce. Představují spíše zájem o názor habilitantky na některé oblasti jejího výzkumu.

K části habilitační práce předcházející vlastním publikacím lze z formálního hlediska vyslovit několik drobnějších připomínek, které není nutné diskutovat během obhajoby: např. seznam zkratk – prohozen anglický popis zkratk DDA, DIA; str. 13 „...publikovaných vědeckých prac od roku 1990.“ – patrně myšleny práce z oblasti analytické chemie; str. 15 – již byly publikovány práce dokládající rozlišovací schopnost FT-ICR v desítkách miliónů; str. 16 dole – opakování části textu; str. 19 – termosprej nepracuje za atmosférického tlaku; str. 20 – „...nízko a vysokoenergetickéj CID,...“ – vysokoenergetická CID využívá kinetických energií v keV, což zde neplatí, lépe tedy CID při nižší a vyšší kolizní energii;

K předložené habilitační práci mám následující dotazy a náměty do diskuze:

1. Na str. 20 jsou diskutovány matriční efekty, přičemž v bodě 1 se hovoří o saturaci při vysokých koncentracích analytu. Je opravdu myšlena vysoká koncentrace analytu, nebo jde o koncentraci

složek matrice?

2. Zrychlování účinných separací (str. 29) je jedním z trendů, které provázejí vývoj separačních metod. Jaké problémy však toto zrychlování může přinášet pro hmotnostně spektrometrickou detekci separovaných látek?

3. Autorka využívá hmotnostní spektrometrii k identifikaci látek v komplexních vzorcích. Nesetkala se s rozdílnou úspěšností identifikace pro různé třídy studovaných analytů? Jak by případně mohly být navržené struktury ověřeny?

4. Ambientní ionizační technika LDTD byla využita v práci v kvantitativní analýze. Jak hodnotí habilitantka možnosti ambientních ionizačních technik v kvantitativní analýze?

5. Autorka pozorovala zlepšení signálu v MS při spojení CE-ESI-MS. Považuje toto zlepšení za obecnější jev, nebo je omezeno na konkrétní látky?

Výzkumná problematika popsaná v habilitační práci je zajímavá z pohledu studia procesů využívaných v analytických metodách i z pohledu možných aplikací vyvinutých metod. Mohu konstatovat, že RNDr. Andrea Vojs Staňová, PhD., zpracovala téma habilitační práce s patřičným nadhledem. Její výzkum zahrnuje poznatky významné pro rozvoj analytických metod vhodných pro analýzu komplexních vzorků. Jak již bylo uvedeno, publikace, které jsou součástí habilitačního spisu, prošly řádným recenzním řízením a představují kvalitní vědecké práce. Habilitační práce poskytuje potřebný přehled o výzkumné činnosti autorky, dokumentuje její vědecké kvality a naznačuje propojení její vědecké a pedagogické práce. Předložená práce je zcela v souladu s požadavky kladenými na habilitační práci. Lze ji doporučit k jednání před Vědeckou radou a zároveň vyslovit přesvědčení, že se stane základem pro úspěšné habilitační řízení.

Závěr

Habilitační práce RNDr. Andrei Vojs Staňové, PhD., dokumentuje odborné kvality autorky a **splňuje požadavky standardně kladené na habilitační práce. Práci doporučuji k obhajobě.**

V Olomouci, dne 14. 3. 2021

prof. RNDr. Karel Lemr, Ph.D.

oponent

Přírodovědecká fakulta

Univerzita Palackého v Olomouci