



PŘÍRODOVĚDECKÁ
FAKULTA
Univerzita Karlova

Posudek doktorské disertační práce

Mgr. Michaely Malečkové

s názvem

A STUDY OF NON-VOLATILE NITROSO COMPOUNDS IN BREWING

Studium netěkavých nitrososloučenin v pivovarství

vypracované ve studijním programu Analytické chemie

na Přírodovědecké fakultě Univerzity Karlovy

v roce 2023

Tématem předložené práce jsou příprava, detekce a určení struktury neznámých derivátů nitrosovaných látek a studium jejich výskytu v pivu a ve sladu. Součástí předkládané práce je i aplikace softwaru použitého pro predikci retenčních indexů z molekulové struktury využívající hluboké učení (deep learning). V práci byly k analýzám vzorků použity metody plynové chromatografie s hmotnostní, dvojitou hmotnostní detekcí a se specifickým chemiluminiscenčním detektorem.

Práce má rozsah 108 stran a obsahuje tři příložené publikace, kde u prvních dvou je doktorandka první autorkou, a 4 přílohy doplňující uvedené práce. Publikace předchází 56 stran textu uvádějících publikovaná data do vzájemných souvislostí. Formálně je úvodní text rozdělen na standardní kapitoly, kdy ve výsledcích a diskuzi jsou rovněž shrnuty výsledky jednotlivých článků. Příložen je rovněž seznam publikací, přednášek a posterů, kde je doktorandka autorkou či spoluautorkou. Z hlediska struktury a rozsahu tedy práce zcela vyhovuje požadavkům na disertační práci. Práce je napsána čtivě a formální úprava je pěkná.



Dotazy a komentáře

Jelikož je práce založena na souboru tří článků, které prošly recenzními řízeními, následující dotazy, komentáře a náměty k diskusi jsou spíše obecné povahy.

1. Analytické techniky GC-MS, GC-MS/MS a GC-NCD jsou vhodné hlavně pro těkavé a středně těkavé látky. Pro analýzy netěkavých nitrosovaných látek jsou optimální spíše HPLC metody ve spojení s vhodnými, nejčastěji hmotnostními detektory různých typů. Jaké byly důvody, případně výhody volby GC metod pro řešení vytyčených úkolů práce?
2. V rovnováze oxidů dusíku uvedené na obrázku 4 není N_2O uveden, i když v textu je zmíněn?
3. Pro umělé zvýšení koncentrace sledovaných nitrosovaných látek byly ke vzorkům přidány dusitany. Nemohou takto vznikat nitrosované látky, které by za „normálních“ podmínek ve vzorcích nevznikaly?
4. GC-MS/MS analýza byla provedena s poměrně komplexním teplotním programem. Pro určování přesných retenčních indexů za použití retenčních časů v GC s programovanou teplotou je však nutno dodržet podmínku lineárního růstu teploty (jediný, ne příliš veliký gradient teploty), jinak značně roste chyba určení RI (nejvíce pro nižší alkany). Byly zohledněny tyto vlivy při srovnání experimentálních a vypočtených hodnot RI?

Předkládaná práce má nespornou vědeckou hodnotu, obsahuje velké množství správně vyhodnocených a interpretovaných experimentálních dat. Uvedené komentáře a dotazy, vyplývající z mého zájmu, nejsou takového charakteru, aby snížily nebo zpochybnilly celkovou kvalitu předkládané práce, a proto ji plně doporučuji k přijetí a k udělení titulu Ph.D.

Praha, 27.01. 2024

doc. RNDr. Radomír Čabala, Dr.