

Posudek školitele na diplomní práci Bc. Ireny Niesnerové na téma

Stanovení disociačních konstant vybraných léčiv potenciometrickou a spektrofotometrickou titrací

Potenciometrické a spektrofotometrické stanovení disociačních konstant tří vybraných léčiv představuje nalezení chemického modelu reakčního produktu, tzn. počtu částic, jejich stechiometrii, jejich rovnovážné koncentrace spolu s protonačními konstantami rozličně protonovaných oligomerních částic regresní analýzou pH-titračních křivek a pH-spekter. Důležitými pomůckami jsou zde regresní diagnostiky k ověření věrohodnosti hledaného modelu a statistická analýza reziduí po provedené nelineární regresi. Trvá obvykle dlouho, než se pracovník naučí diagnostikovat s náročnějším softwarem SPECFIT, SQUAD, ESAB a HYPERQUAD a začne získávat validní výsledky.

Irena Niesnerová pracovala na diplomové práci již od 4. ročníku a naučila se nelineární regresi, metody faktorové analýzy, makra tabulkového procesoru Excel, a stejně jako i objektově orientovaný statistický systém S-Plus. Potřebnými programy otestovala řadu hypotéz chemického modelu, než dospěla k relevantním závěrům.

Nejcennější na diplomové práci je věrohodné zpracování pH-potenciometrických titračních křivek a spekter nelineární regresi, a tím i věrohodné odhady disociačních konstant studovaných 3 nových léčiv firmy Zentiva Praha. Vlastní diplomová práce je napsaná stručným publikačním jazykem s elektronickým zařazováním obrázků z Originu do textu a ukazuje solidní zvládnutí textového editoru Word 2007 dle zásad počítačové typografie. Prokazuje tím také dobrou připravenost k prezentaci výsledků své vědecko-výzkumné práce.

Diplomovou prací jmenovaná prokázala, že je dobře připravena k samostatné vědecko-výzkumné práci s náročnějším počítačovým a statistickým zpracováním dat. V experimentální práci se pečlivost a věrohodnost naměřených dat prozrazuje velmi nízkými směrodatnými odchylkami, totiž veličiny, v níž se propagují všechny experimentální náhodné chyby a tím i šum celého experimentu. Dosažené výsledky považují za velice cenné, protože umožnily dokončení a odeslání 3 publikací do zahraničních impaktovaných časopisů.

Přístup k vědecko-výzkumné práci a dosažené výsledky hodnotím známkou

výborně

V Pardubicích 15. května 2012


Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.