

Posudek školitele na diplomní práci Bc. Veroniky Nečasové na téma

**Spektrofotometrické a potenciometrické stanovení disociačních konstant  
cytostatika bosutinib regresní analýzou dat**

Potenciometrické a spektrofotometrické stanovení disociačních konstant cytostatika bosutinib se týká nalezení chemického protonačního modelu léčiva Zentivy a.s. Praha, obsahující počet částic, jejich stechiometrii, jejich rovnovážné koncentrace spolu s disociačními konstantami rozličně protonovaných částic regresní analýzou potenciometrických titračních křivek a pH-spekter. Důležitými pomůckami jsou zde regresní diagnostiky k ověření věrohodnosti hledaného modelu a statistická analýza reziduí po provedené nelineární regresí. Trvá obvykle dlouho, než se pracovník naučí diagnostikovat s náročnějším softwarem SPECFIT, SQUAD, ESAB a HYPERQUAD a začne získávat validní výsledky.

Veronika Nečasová, Bc. pracovala na diplomové práci již od 4. ročníku a naučila se nelineární regresí, metody faktorové analýzy, makra tabulkového procesoru Excel, a stejně jako i objektově orientovaný statistický systém S-Plus a grafický software Origin 9. Potřebnými programy otestovala řadu hypotéz chemického modelu, než dospěla k relevantním závěrům.

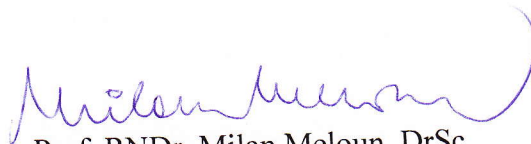
Nejcennější na diplomové práci je věrohodné zpracování pH-potenciometrických titračních křivek a pH-spekter nelineární regresí, a tím i věrohodné odhady disociačních konstant studovaného cytostatika, zadaného firmou Zentiva, a.s. Praha. Vlastní diplomová práce je napsaná stručným publikačním jazykem 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 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 publikace do zahraničního impaktovaného časopisu.

Přístup k vědecko-výzkumné práci a dosažené výsledky hodnotím známkou

**výborně minus.**

V Pardubicích 25. května 2015

  
Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.