

Stanovení disociačních konstant léčiva Bedaquilinu

Cíl a téma: Potenciometrické a spektrofotometrické stanovení disociačních konstant léčiva Bedaquilinu se týká nalezení protonačního modelu od léčiva, zadaného firmou Zentiva k. s., Praha. To se týká stanovení počtu rozličně protonovaných částic, jejich stechiometrie, jejich rovnovážných koncentrací spolu s disociačními konstantami iontů regresní analýzou potenciometrických titračních křivek a regresní analýzou pH-spekter. Pomůckami jsou regresní diagnostiky k ověření věrohodnosti hledaného modelu a statistická analýza reziduí po provedené nelineární regresi. Cílem diplomové práce bylo zvládnout základy výzkumné práce, spočívající především v následujících 4 krocích:

1) Dokonalá počítačová řešerše dostupných publikací o vlastnostech a protonačních rovnováhách Bedaquilinu programem ENDNOTE 4 a WoS. Dále kvantově-chemická predikce disociačních konstant programy MARVIN a ACD/Percepta.

2) Pečlivé provedení experimentu pH-spektrofotometrické titrace a pH-potenciometrické titrace. Pečlivost experimentální práce byla sledována ve statistikách počítačově vyhodnocovaných dat. Zrcadlem experimentu byl studentkou laboratorní deník v software EXCEL, vedený dle požadavků akreditačních komisí na biochemické laboratoře.

3) Vyhodnocením dat regresní analýzou byly vedle hledání správného protonačního modelu sledovány především regresní diagnostiky o věrohodnosti nalezeného modelu, kvalitě dat a přesnosti a správnosti nalezených odhadů disociačních konstant programy SQUAD84, REACTLAB a ESAB. Ty pak byly rozhodčím kritériem správnosti, zda byly dosažené výsledky použitelné k veřejnění v impaktovaném časopise.

4) Vědecká prezentace a chemická interpretace nalezených protonačních schemat spolu s disociačními konstantami.

Hodnocení: Daniela Cyrmonová, Bc. pracovala od 5. ročníku v laboratoři katedry analytické chemie, a naučila se pečlivé experimentální práci na spektrofotometru CINTRA 40. V pátém ročníku otěhotněla a od porodu v dubnu 2020 je na mateřské dovolené. Přesto úkoly dokončení diplomové práce s vypětím sil a s osobním nasazením zvládla. Diplomová práce je napsaná dle přání školitele 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.

Závěr: Svou diplomovou prací jmenovaná prokázala, že je dobře připravena k samostatné vědecko-výzkumné práci s náročnějším počítačovým statistickým zpracováním dat. Dosažené výsledky považují za velice cenné, protože umožnily dokončení a odeslání rukopisu do zahraničního impaktovaného časopisu v dubnu 2020, rukopis je přiložen k diplomové práci.

Přístup k vědecko-výzkumné práci a dosažené výsledky hodnotím známkou

Velmi dobře, čili C

V Pardubicích 9. června 2020

Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc., školitel