

Posudek školitele na diplomní práci Bc. Martina Kaštánka na téma

Spektrofotometrické stanovení disociačních konstant vybraných léčiv

Spektrofotometrické stanovení disociačních konstant léčiv představuje nalezení chemického modelu reakčního produktu, t. zn. počtu částic, jejich stechiometrii, jejich rovnovážné koncentrace spolu s protonačními konstantami a molárními absorpčními koeficienty rozličně protonovaných částic regresní analýzou spekter anebo pH-potenciometrických titračních křivek. Důležitými pomůckami jsou zde regresní diagnostiky k ověření věrohodnosti hledaného modelu, faktorová analýza k určení počtu všech světlo-absorbujících částic rovnovážné směsi a statistická analýza reziduí po provedené nelineární regresí. Trvá obvykle dlouho než se pracovník naučí diagnostikovat s náročnějším softwarem SQUAD a SPECFIT, ale také ESAB a HYPERQUAD a začne získávat validní výsledky. Obtížné je rovněž orientovat se v numerických metodách faktorové analýzy při určení hodnoty matice, která se zde rovná počtu světlo-absorbujících částic analýzou vějíře spekter.

Martin Kaštánek pracoval na diplomové práci již od 4. ročníku a zvládl dokonale nelineární regresí, metody faktorové analýzy, makra tabulkového procesoru Excel a stejně jako i objektivě orientovaný statistický systém S-Plus. Programy SQUAD a SPECFIT otestoval řadu hypotéz chemického modelu než dospěl k relevantním závěrům.

Nejcennější na diplomové práci je věrohodné zpracování pH-absorbančních responzních ploch anebo pH-titračních křivek nelineární regresí, a tím i věrohodné odhady disociačních konstant studovaných 4 léčiv. 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 jmenovaný prokázal, že je dobře připraven k samostatné vědecko-výzkumné práci s náročnějším počítačovým zpracováním dat. V experimentální práci se pečlivost a věrohodnost naměřených dat prozrazuje velmi nízkými směrodatnými odchylkami absorbance okolo 0.3 mAU, totiž veličiny, v níž se propagují náhodné chyby, šum celého experimentu. Dosažené výsledky považuji 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 2010


Prof. RNDr. Milan Meloun, DrSc.