

## Posudek školitele na diplomní práci Bc. Lucie Netolické na téma Potenciometrické stanovení disociačních konstant vybraných léčiv

Potenciometrické stanovení disociačních konstant vybraných dronátů představuje nalezení chemického modelu reakčního produktu, tzn. počtu částic, jejich stechiometrii, jejich rovnovážné koncentrace spolu s protonačními konstantami rozličně protonovaných částic regresní analýzou titračních křivek. 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 ESAB a HYPHERQUAD a začne získávat validní výsledky.

Lucie Netolická 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. Programy ESAB a nový software HYPERQUAD otestovala řadu hypotéz chemického modelu, než dospěla k relevantním závěrům.

Nejcennější na diplomové práci je věrohodné zpracování pH-potenciometrických titračních křivek nelineární regresi, 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 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 titračního činidla menšími než 0.1 mikrolitr, totiž veličiny, v níž se propagují všechny experimentální náhodné chyby a tím i šum celého experimentu. Dosažené výsledky považuji za velice cenné, protože umožnily dokončení a odeslání 2 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.