

## Oponentský posudek bakalářské práce - Kristýna Průchová „Ramanova spektroskopie – tvorba a využití spektrální databáze“

Bakalářská práce Kristýny Průchové se zabývá částečným zmapováním volně přístupných i komerčních knihoven Ramanských spekter dostupných na internetu i v knižní podobě a dále pak vytvořením nové elektronické databáze spekter vybraných organických a anorganických látek a to dvěma cestami - digitalizací spekter v pdf formátu z knihovny firmy Sigma-Aldrich a vlastním měřením dostupných látek. Zpracovaná uživatelská databáze obsahuje Ramanova spektra okolo 160 látek a mj. obsahuje také látky používané ve farmaceutickém průmyslu a potravinářství. Funkčnost databáze byla ověřena prostřednictvím identifikace látek ve třech vzorcích léčiv s využitím a testováním několika porovnávacích algoritmů, z nichž byl vybrán ten nejvhodnější.

K řešení určených cílů adeptka zjevně přistoupila zodpovědně a velmi systematicky. Práce tak tvoří kompaktní celek s jasně deklarovanými výsledky, někdy ale trochu nešťastně a neúplně podanými v textu, z čehož pak vychází několik nejasností (viz otázky a připomínky). Nicméně, až na, dle mého názoru, relativně nepovedenou první část práce, je patrné, že cíle práce byly splněny, ocenil bych i ověření funkčnosti databáze. Za nejvýznamnější výsledky práce lze považovat poměrně ucelenou informaci o existenci, dostupnosti a obsahu řady databází Ramanových spekter, kterou nepochybně využije řada experimentátorů v dané oblasti, stejně tak jako vytvořenou (byť částečně převzatou) databázi spekter.

K práci mám několik připomínek a poznámek. Citování zdrojů se mi nezdá být úplně nejšťastnější. Např. už citace [1] se odkazuje na článek v časopise, ačkoliv natolik obecné tvrzení by si spíše zasloužilo citaci na přehledový a obecnější zdroj. Je nepochybné, že toto relativně již obecné tvrzení se nachází i v dalších zdrojích autorkou citovaných (a některé by se možná hodily více). Dle mého se často také nachází za každou větou jiná citace, i přesto, že totéž lze najít i v citaci předchozí. Nepovažuji to za zásadní problém a není to porušením žádného pravidla, ale pro uživatele, který se chce o Ramanově spektroskopii dozvědět více, je to poněkud nepraktické. Další drobnější výtkou je forma úvodu a teoretické části. Kapitoly jsou zpracovány poněkud nehomogenně a nevyváženě, navíc se v nich nachází několik formulačních nepřesností a zavádějících informací (např., že Ramanova spektroskopie je založena na rozptylu fotonů z laserového zdroje – to není chybné konstatování, ale zdroj nemusí být nutně laserový, zvláště, když autorka sama v další větě uvádí, že Raman jev objevil na základě rozptylu slunečního záření). Takových nepřesností je v textu více, ale nikoliv nejde o zásadní množství. V této kapitole taktéž chybí část zabývající se experimentálním uspořádáním, jehož prvky jsou ale potom poměrně detailně rozebírány v další části, aniž by to bylo ale nezbytně nutné. Některé informace mi v souvislosti s tím, co bylo uvedeno, chyběly, např. podrobnější popis a srovnání nevýhod a výhod měření s výkonnými lasery nižších a vyšších vlnových délek. Celkově není úplně zřejmé, kam se autorka snaží čtenáře svým úvodem dovést.

Menší výhrady bych měl ke kvalitě obrázků, které jsou relativně malé a v ne úplně optimálním rozlišení pro tisk. Obrázek 1 má anglický popis, vzhledem k tomu, že byl ale překreslen z anglického originálu, hodilo by se změnit i popisky do jazyka práce.

I Experimentální část a část týkající se zmapování různých databází by si zasloužily rozšíření a doplňující informace. U komerčních databází např. chybí informace, za jakých podmínek je dostupná (cena, licence apod.). Ačkoliv jde o informace, které se mohou změnit, jako první vodítko toho, zda má pro uživatele daná databáze význam, by bylo užitečné to vědět. Dále by bylo dobré doplnit, zda daná databáze umožňuje i porovnávání naměřených spekter a v jakém formátu se spektra v databázi nachází. V části týkající se porovnávacích algoritmů mi chyběly konkrétní příklady, jak který algoritmus ovlivní shodu. V experimentální části jsem zase postrádal podrobnější popis použitého programu a způsobu zpracování spekter a zpracování a měření vzorků. Např., ačkoliv se některé části práce dotýkají možností měření spekter přímo z blistru (např. v případě léčiv), není zřejmé, zda vzorky byly takto měřeny či nikoliv a jaké to přineslo výsledky. Takovýchto drobných opomenutí by v práci bylo možné najít více, na druhé straně jejich množství není alarmující. V tomto ohledu bych nerad, aby výše uvedené připomínky byly brány jako zásadní,

spíše bych jimi rád adeptku motivoval k tomu, aby nad nimi uvažovala při zpracovávání dalších typů prací podobného charakteru či ve své praxi. Jinak je totiž práce velmi pěkně pojata, je svým způsobem konzistentní, cíle i závěry jsou jasně definovány a byly, jak jsem již konstatoval, splněny.

K práci mám následující dotazy do diskuze:

- 1) Je či bude vámi vytvořená databáze veřejně přístupná? Mohl by ji využít i někdo zvenčí a jakým způsobem by tak mohl učinit? V případě zveřejnění, jak je to s autorskými právy na spektra převzatá z jiných knihoven?
- 2) Z práce nevyplývá, kolik spekter v databázi bylo změřeno Vámi a kolik spekter je převzato z jiné databáze. Můžete to specifikovat?
- 3) Na str. 18 v sekci „Algoritmus založený na korelačním ...“ je ve vzorci pro uvedený algoritmus uvedeno písmeno  $N$ , ale to není dále specifikováno. Můžete je specifikovat?
- 4) Jsou některé databáze spekter volně dostupné na internetu také vybaveny aparátem algoritmů pro porovnávání s uživatelskými spektry nebo je toto nezbytné dělat jinak? Můžete případným uživatelům poradit jak se k nějakému podobnému aparátu dostat a popř. dále více konkretizovat?
- 5) Jaké formáty se pro porovnávací algoritmy nejčastěji používají a čím je to dáno?
- 6) Jak jste připravovala vzorky pro měření spekter do databáze a dále vzorky léčiv pro otestování databáze? Zkusila jste měření v blistrech?

Závěrem konstatuji, že výše zmíněné připomínky nijak nesnižují kvalitu práce, a že předložená práce svým odborným přínosem, obsahem a formou splňuje všechny požadavky kladené na bakalářskou práci a plně doporučuji její přijetí k obhajobě.

V Praze dne 8.6. 2010

RNDr. Petr Šmejkal Ph.D.