

Posudek školitele
**na bakalářskou práci pana Ondřeje Hruboše „Stanovení LD50 na potkanech po různé
inhalační aplikaci a vliv délky expozice – analýza QSAR“.**

Pan Ondřej Hruboš vypracoval svou bakalářskou práci na katedře analytické chemie Přírodovědecké fakulty UK v Praze pod vedením doc. Zuzany Bosákové a na pracovištích Státního zdravotního ústavu se školitelem konzultantem doc. Miloněm Tichým.

Práce neměla experimentální charakter, ale byla zaměřena na vyhledávání experimentálních údajů v literatuře a toxikologických datových souborech a jejich porovnání a zpracování technikami QSAR. Práce se týká porovnání údajů, naměřených při různé době inhalační expozice s potkanem. Byla provedena analýza QSAR pomocí rozdělovacího koreficientu látek mezi n-oktanol a vodu.

Byla vytvořena datová báze indexů akutní inhalační toxicity LC50 pro 40 látek s rozdílnou chemickou strukturou, a to pro různou délku expozice od 0,5 do 10 hodin.. Počet údajů pro jednotlivé doby expozice (celkem 9 různých délek expozice) byl rozdílný. Pan Hruboš sebral a dohledal všechny primární údaje, které byly v nejrůznějších jednotkách, musel porovnat podmínky stanovení, nakonec i důvěryhodnost údajů. Tabulku primárních údajů s citacemi přiložil ke své práci. Vše přepočtl na jednotky mmol/L vzduchu.

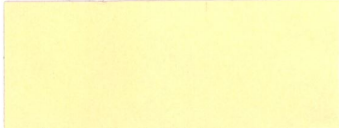
Vztah mezi různou dobou expozice a LC50 nemohl být studován pro nedostatek nalezených dat. Pro korelaci s rozdělovacím koeficientem látek mezi n-oktanol a vodu byly vybrány údaje měřené po 4 hodinové expozici, kterých bylo nejvíce. Pokusil se zpracovat i údaje z ostatních expozic. Závěrem konstatoval, že formální lineární vztah mezi logaritmem rozdělovacího koeficientu látek mezi n-oktanol a vodu a logaritmem indexu akutní inhalační toxicity LC50 existuje u strukturně homogenních souborů látek. Vzhledem k rozdílným parametrům rovnic pro jednotlivé skupiny látek korelace v celém souboru nebyla nalezena.

Rozumně interpretoval své nálezy. A to, že rozptýl použitých dat může znamenat, že jde o nevýznamnou až žádnou závislost hodnot $\log P$ a $\log LC0$ nebo může jít o nepřesnosti experimentálních hodnot, jak je našel v literatuře od různých laboratoří.

Musím vyzdvihnout tvůrčí přístup pana Hruboše při aktivním hledání cesty ke zpracování údajů a při interpretaci výsledků. Pracoval samostatně ve všech fázích vypracování práce. Upozornil na nesrovnalosti některých prací při přepočtu jednotek ppm na molární jednotky. Schopnost spolupráce hodnotím dobře a zájem o práci a pracovní nasazení bylo výborné. Jeho práce a její výsledky budou využity na pracovištích Státního zdravotního ústavu.

Předkládanou bakalářskou práci pana Ondřeje Hruboše doporučuji k obhajobě a po úspěšné obhajobě k dalšímu řízení.

Praha, 15. června 2007


Doc. RNDr. Miloň Tichý, DrSc.

Doc. RNDr. Zuzana Bosáková, CSc.