

UNIVERZITA KARLOVA
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ
Katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy

Studijní program: Farmacie

Posudek vedoucího / konzultanta diplomové práce

Rok zadání: 2019

Rok obhajoby: 2021

Autor/ka práce: **Jitka Vávrová**

Vedoucí práce: PharmDr. Marta Kučerová, Ph.D.

Konzultant/ka: -

Oponent/ka: doc. PharmDr. Jan Zitko, Ph.D.

Název práce: **Tvorba virtuální knihovny syntetických látek pro praktické využití v molekulově modelovací studii**

Rozsah práce: 82 stran, 46 obrázků, 14 tabulek, 88 citací

Hodnocení experimentální práce:

- | | |
|---|---------|
| a) Zvládnutí metodických postupů: | výborné |
| b) Zručnost v laboratoři nebo při získávání experimentálních dat: | výborná |
| c) Samostatnost: | výborná |
| d) Iniciativa a píle: | výborná |
| e) Pečlivost a svědomitost: | výborná |

Hodnocení zpracování výsledků a sepisování práce:

- | | |
|--|---------|
| a) Zpracování výsledků (pečlivost a samostatnost): | výborné |
| b) Interpretace a diskuse výsledků (pečlivost a samostatnost): | výborná |
| c) Literární rešerše: | výborná |
| d) Zpracování textu (stylistická úroveň): | výborné |
| e) Formální úroveň práce (členění textu, grafické zpracování): | výborná |

Doporučuji diplomovou práci k uznání jako práci rigorózní

Slovní hodnocení, výrazné rysy autora/ky a práce:

Jitka Vávrová začala pracovat na své diplomové práci v průběhu 3. ročníku. Téma počítačové chemie ji velmi zajímalo a přistupovala k němu velmi aktivně. Tomu pomohlo také absolvování předmětu Základy molekulového modelování léčiv ve 4. ročníku. Sestavila databázi látek připravených v laboratoři doc. RNDr. V. Opletalové, Ph.D., v níž lze prohledávat již publikované podrobnosti k sloučeninám. Dále provedla hromadné výpočty molekulových deskriptorů, které zanalyzovala z hlediska drug-like a lead-like parametrů. Sloučeniny jsou uloženy ve 3D formátu, což využila v dokovací studii. Některé makromolekulární cíle si dohledala sama na základě rešerše zaměřené na biologické působení strukturních typů z databáze.

Studentka pracovala velmi pilně, aktivně a velmi pečlivě. Část výsledků využila k prezentaci na XXVIII. SVK 13. 4. 2021 v Hradci Králové s názvem Creation of a virtual library of synthetic compounds and its practical usage for docking with aldose reductase.

S prací Jitky Vávrové jsem byla moc spokojená. Závěrečné úpravy vyžadovaly jenom drobné korektury.

hodnocení, práce je: výborná

k obhajobě: doporučuji

V Hradci Králové

18. května 2021

podpis vedoucí/ho