



UNIVERZITA KARLOVA  
Farmaceutická fakulta  
v Hradci Králové

## Zápis o části státní závěrečné zkoušky Obhajoba závěrečné práce

Akademický rok: 2020/2021

**Jméno a příjmení studenta:** Jitka Vávrová

**Rok narození:** 1997

**Identifikační číslo studenta:** 59979827

**Typ studijního programu:** magisterský

**Studijní program:** Farmacie

**Studijní obor:** Farmacie

**Identifikační čísla studia:** 499661

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

**Pracoviště práce:** Katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy (16-16190)

**Jazyk práce:** čeština

**Jazyk obhajoby:** čeština

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

**Oponent(i):** doc. PharmDr. Jan Zitko, Ph.D.

**Datum obhajoby:** 01.06.2021      **Místo obhajoby:** Hradec Králové

**Průběh obhajoby:** Po prezentaci výsledků DP a přečtení školitelského i oponentského posudku, zodpověděla studentka s pomocí připravené prezentace uspokojivě dotazy oponenta.

V diskusi byly vzneseny tyto dotazy:

Dr. Juhás: Na obrázku v prezentaci byla uvedena v tabulce interakce nízkomolekulární látky s enzymem HadAB přes molekulu vody, avšak v na obrázku toto vidět nebylo. Jako příklad byl vybrán obrázek s druhým zmíněným typem interakce.

Jak si vysvětlujete, že při rentgenové krystalografii nízkomolekulárních sloučenin jsou viditelné vodíkové atomy, zatímco při analýze proteinu vidět nejsou?

Doc. Kučera: Jaké hodnoty skóre jsou u dokování výhodné?

Jaký smysl má počítat průměrnou molekulovou hmotnost látek v databázi, když záleží na distribuci hodnot v souboru.

Jaká je vzdálenost 4 angströmy?

Prof. Zimčík: Uvažovali jste při sestavování databáze geometrické izomery?

Diplomantka zodpověděla uspokojivě všechny dotazy a přijal připomínky diskutujících.

<b>Výsledek obhajoby:</b>	výborně (1)	
<b>Předseda komise:</b>	prof. PharmDr. Petr Zimčík, Ph.D.	.....
<b>Členové komise:</b>	doc. PharmDr. Radim Kučera, Ph.D.	.....
	doc. PharmDr. Miroslav Miletín, Ph.D.	.....
	doc. PharmDr. Jan Zitko, Ph.D.	.....