



UNIVERZITA KARLOVA
Farmaceutická fakulta
v Hradci Králové

ŠKOLITELSKÝ POSUDEK

Kandidát: PharmDr. Martin Juhás

Školitel: prof. Martin Doležal (do 30. 9. 2020), doc. Jan Zitko (od 1. 10. 2020 dosud)

Název práce: Příprava derivátů pyrazinamidu jako potenciálních antiinfektív. (Štúdium vzťahov medzi chemickou štruktúrou a biologickou aktivitou)

PharmDr. Martin Juhás (dále MJ) nastoupil do prezenční formy doktorského studia oboru Farmaceutické chemie FaF UK v říjnu 2018. Během doktorského studia úspěšně složil čtyři dílčí zkoušky a v únoru 2021 rovněž státní doktorskou zkoušku z farmaceutické chemie. MJ dále splnil všechny ostatní náležitosti jeho individuálního studijního plánu (podání projektu GA UK, zahraniční stáž, publikační aktivita).

Od počátku svého doktorského studia se MJ aktivně zapojil do vědecké práce našeho týmu. Zpočátku se zabýval hlavně syntézami jednoduchých derivátů pyrazinamidu. Později se přiklonil k racionálnímu, počítačem podporovanému návrhu léčiv (CADD) s konkrétními subcelulárními cíli. MJ se velmi rychle zdokonalil v oblasti počítačové chemie, kde obratem zvládl základní metody založené na molekulové mechanice (energetické minimalizace, docking) a pustil se do studia molekulární dynamiky a metod založených na kvantové mechanice (QM). Tyto pokročilé metody vyžadovaly zvládnutí práce v operačním systému Linux, práci s příkazovým řádkem, skriptování, spouštění dávkových úloh (batch) přes systém front, základy gridového počítání a další. Z vlastní iniciativy se MJ dále zdokonaloval v programování (batch scripting, Python). V letech 2021–22 se MJ na podnět školitele zapojil do výpočtového projektu s podporou GAČR (19-14886Y, hlavní řešitel Jana Pavlíková Přecechtělová) na téma predikce NMR posunů neuspořádaných fosforylovaných proteinů a naučil se programovat v C++. V rámci povinné zahraniční stáže (Uni Wien, 3 měsíce) si MJ osvojil základy proteochemometrie a deep learningu. Během svého studia se tak MJ stal erudovaným odborníkem na metody CADD.

V roce 2020 absolvoval tříměsíční stáž na Univerzitě v Lublani (Slovinsko), kde si pod vedením prof. Izidora Sosiče osvojil některé metody hodnocení interakce léčiva s proteinem (ITC, enzymové eseje). Výsledkem této stáže byla společná prvoautorská publikace se zahraničním pracovištěm.

Jako úspěšné hodnotím zapojení MJ do výuky pregraduálních studentů v rámci praktických cvičení z předmětů Farmaceutická chemie I a Základy molekulového modelování léčiv. MJ se aktivně podílel na tvorbě studijních materiálů pro nově připravovaný kurz/předmět na téma CADD s použitím open-source programů. V posledních dvou letech studia MJ již zcela samostatně a úspěšně vedl diplomové práce v roli konzultanta (celkem 4, z toho 3 obhájené) a byl nápomocen mladším doktorandům.

MJ byl hlavním řešitelem dílčího projektu (Design, synthesis and biological evaluation of 2-aminooxazoles as antibacterial compounds, START/MED/017, dotace 4,2M CZK) v rámci projektu Grantová schémata na UK (program START). V rámci tohoto projektu se kromě vědecké práce naučil i soft-skills ve smyslu řízení malého multidisciplinárního týmu doktorandů.

Výsledky své vědecké práce publikoval MJ v celkem osmi zahraničních impaktovaných publikacích, z čehož čtyři jsou prvoautorské. Aktivně se účastnil domácích i zahraničních konferencí. Publikační aktivitu hodnotím jako nadprůměrnou.

Závěrem je možno konstatovat, že Martin Juhás je plně schopen samostatné vědecké práce v oblasti farmaceutické chemie, počítačového návrhu léčiv a příbuzných oborech. Jeho disertační práci doporučuji k obhajobě a v případě úspěšné obhajoby navrhuji udělení titulu Ph.D. v oboru Farmaceutická chemie.

Hradec Králové 10.04.2023

doc. PharmDr. Jan Zitko, Ph.D.

školitel

Katedra farmaceutické chemie a farmaceutické analýzy

Farmaceutická fakulta, Univerzita Karlova

Ak. Heyrovského 1203/8, 500 05, Hradec Králové, Česká republika

tel: +420-495-067-409 e-mail: jan.zitko@faf.cuni.cz