

# Abstrakt

Nguyen, T. P.: Izolace, strukturní analýza a *in silico* predikce vybraných parametrů ADMET u alkaloidů izolovaných z *Croton linearis* Jacq. (Euphorbiaceae); Diplomová práce, Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové, Katedra farmakognozie a farmaceutické botaniky, Hradec Králové 2025, počet stran 93.

Předmětem této diplomové práce byla izolace a identifikace alkaloidů z dichlormethanového extraktu rostliny *Croton linearis* Jacq. (Euphorbiaceae) a následná *in silico* predikce vybraných parametrů ADMET. Z vybraných frakcí (tj. CL-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-7, CL-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-8 a CL-CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>-13) byly pomocí chromatografických metod izolovány alkaloidy (+)-kularin, (+)-glaucin a (–)-laudanidin. Struktura jednotlivých sloučenin byla potvrzena pomocí GC-MS, LC-MS, NMR analýz a měření specifické optické otáčivosti. V rámci *in silico* hodnocení byly pomocí softwarů SwissADME a ProTox-3.0 predikovány fyzikálně-chemické vlastnosti (počet akceptor a donor vodíkových vazeb, celková polární povrchová plocha, konsenzuální logaritmus rozdělovacího koeficientu oktanol/voda), farmakokinetické vlastnosti (gastrointestinální absorpce, propustnost přes hematoencefalickou bariéru, inhibice cytochromů a interakce s P-glykoproteinem) a toxikologické charakteristiky (LD<sub>50</sub> po perorálním podání, třída toxicity). Všechny sloučeniny splnily Lipinského pravidlo pěti i Veberovo pravidlo. Na základě predikovaných dat vykazují zkoumané alkaloidy příznivý farmakokinetický i toxikologický profil a mohou představovat perspektivní kandidáty pro další výzkum v oblasti léčiv cílených na centrální nervový systém.

Klíčová slova: *Croton linearis*, alkaloidy, izolace, strukturní analýza, *in silico* predikce ADMET