

Abstrakt

Univerzita Karlova v Praze, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Katedra: Farmaceutická chemie kontrola léčiv

Vedoucí práce: **PharmDr. Ondřej Holas, Ph.D.**

Diplomant: **Jakub Kratochvíl**

Název diplomové práce: **Molekulárně modelovací studie potencionálních inhibitorů acetylcholinesterasy.**

Tato práce se zabývá využitím molekulárního dockingu pro ověření schopnosti vybraných látek inhibovat enzymy acetylcholinesterasu a butyrylcholinesterasu. Jako ligandy vázající se do aktivního místa enzymu byly vybrány známé inhibitory AChE (donepezil, takrin, galanthamin, huperzin A), u kterých byla ověřena jejich aktivita. Dále byly zkoumány látky s určitým inhibičním potenciálem, který byl ve většině případů potvrzen. Pro studie byly použity známé struktury cholinesteras z lidského organismu a dále z Parejnoka kalifornského (*Torpedo californica*). Samotná experimentální část probíhala na PC s pomocí programů MGL Tools, PyMOL, Chimera a Autodock Vina.