

**UNIVERZITA KARLOVA V PRAZE  
FARMACEUTICKÁ FAKULTA V HRADCI KRÁLOVÉ**

Katedra Farmaceutické technologie

Studijní program: Farmacie

**Posudek vedoucího / školitele diplomové práce**

Autor/ka práce: **František Slovák**

Vedoucí / školitel práce: PharmDr. Ondřej Holas, Ph.D.; KFT

Rok zadání: 2014

Konzultant: uvedtĚ, je-li i mimofakultní

Rok obhajoby: 2016

Název práce:

**MolekulárnĚ modelovací studie potenciálních inhibitorů mykobakteriální enoyl-reduktasy**

---

TĚma práce si autor/ka zvolil/a sÁm/a.

Práce s literaturou autora/ky byla prŮmĚrnÁ.

JazykovÁ vybavenost autora/ky byla vŮbornÁ.

Invence autora/ky byla vŮbornÁ.

Iniciativa autora/ky byla vŮbornÁ.

Autor/ka pracovala s dopomocí samostatnĚ, zodpĚdnĚ.

ProblĚmy, pokud se vyskytly, řešil/a s pomocí vedoucího.

MetodickÁ zdatnost a zručnost autora/ky byla vŮbornÁ.

Interpretace vŮsledkŮ byla samostatnÁ, s malými korekcemi.

Hodnocení vŮsledkŮ v kontextu jiných prací bylo zodpĚdnĚ.

Práce v kolektivu, kooperativnost autora/ky byla vŮbornÁ.

Zpracování textu práce bylo samostatnĚ, s malými korekcemi a bylo pečlivĚ.

GrafickÁ a jazykovÁ ůprava byla vŮbornÁ.

PŮsobení autora/ky na katedře bylo pŮnospĚ.

Slovní hodnocení, vŮraznĚ rysy autora/ky a práce:

TĚma řešenĚ diplomovĚ práce, virtuální screening inhibitorů mykobakteriální enoyl-reduktasy, si student zvolil sÁm na zÁkladĚ konzultace pŮi vypisování tĚmat. Na tomto mĚstĚ je tŮeba vyzvednout, Źe si diplomant zvolil tĚma, kterĚ je v rÁmci fakulty zŮejmnĚ prvnĚm svĚho druhu.

Diplomant pŮstupoval k práci svĚdomitĚ a aktivnĚ se zajĚmal o dalšĚ možnosti vyuŹitĚ počítačovĚ chemie. PomĚrnĚ rychle podařilo osvojit si práci se softwarem pouŹitým pro molekulovĚ modelování jako je packet MOE nebo free verze Glide od firmy Schrödinger a pracoval samostatnĚ a intuitivnĚ. Brzy si osvoжил zÁkladní principy a zÁsady molekulovĚho modelování a projevil iniciativu pŮi řešenĚ problĚmŮ, kterĚ se pŮi řešenĚ podobných tĚmat vŹdy nutnĚ vyskytují. Ůkoly, kterĚ je tŮeba pŮi řešenĚ molekulovĚho modelování řešit, jako je pŮĚprava receptoru, pŮĚprava knihovny ligandů, hledání optimálního nastavenĚ softwaru řešil student samostatnĚ a pomoc školitele byla nutnÁ jen pŮi interpretaci vŮsledkŮ a plánování dalšĚho modelování.

ZávĚrem lze říci, Źe pŮedkládanÁ práce pŮedstavuje iniciační studii pro hledání dalšĚ potenciálních inhibitorů mykobakteriální enoyl-reduktasy a jeĚ vŮsledky mohou bŮt pouŹity pro celou řadu dalšĚch experimentů jako napŮ. molekulovÁ dynamika nebo in vitro hodnocení, kterĚ mohou v konečném dŮsledku vĚst k nalezení nových ůčinných lÁtek proti M. tuberculosis.

Vyskytli-li se nějaké problémy, bylo to při zpracování práce samotné. Finální podoba práce je nakonec na slušné úrovni.

**Celkové hodnocení: výborně, k obhajobě: doporučuji**

V Hradci Králové dne 19.9 2016

.....  
podpis