



**Univerzita Hradec Králové**

**Přírodovědecká fakulta**

Katedra chemie



**Hodnocení bakalářské práce**

Posudek oponenta



Jméno autora: Denisa Kopečná

Rok obhajoby: 2022



Název práce: Kvantitativní vztahy mezi strukturou a aktivitou inhibitorů FLT3 kinázy užívaných při terapii akutní myeloidní leukémie



Vedoucí práce: Doc. Mgr. et Mgr. Rafael Doležal Ph.D.

Oponent práce: Prof. Ing. Antonín Lyčka, DrSc.



Téma práce:	aktuální
Téma bylo v literatuře:	diskutuje se o něm
Zaměření práce:	původní vědecká práce
Práce je zaměřena:	teoreticky
Jazyková a stylistická úroveň práce:	velmi dobrá úroveň
Rozsah práce:	přiměřený
Použitá literatura:	aktuální
Počet uváděných titulů:	dostatečný
Citace v textu:	přiměřená
Statistické zpracování výsledků:	na dobré úrovni
Formální stránka práce:	odpovídá
Využitelnost pro praxi:	střední
Cíl práce:	splněn
Úroveň práce:	odpovídá požadavkům

Konkrétní náměty, připomínky nebo otázky vyžadující doplnění u obhajoby:

Bakalářská práce Denisy Kopečné je rozsáhlým materiálem prezentovaným na 98 stranách textu. Práce je dělena standardním způsobem do sedmi kapitol.

Po velmi stručném jednostránkovém Úvodu, je v Teoretické části popsán historický vývoj léčby rakoviny se zaměřením na leukemii, protože právě leukemie je předmětem této bakalářské práce. Teoretická část je prezentována velmi přehledně a informativně a je doplněna údaji o současných počítačových metodách výzkumu léčiv.

Cíl práce je uveden na str. 51. Pro analýzu kvantitativních vztahů mezi strukturou a biologickou aktivitou byla v této bakalářské práci vybrána série 35 analogických látek, která byla v roce 2019 publikována v prestižním časopise Journal of Medicinal Chemistry. Jedná se většinou o látky amidického a močovinnového typu nebo heterocyklické sloučeniny obsahující několik atomů dusíku. Cílem bylo provést korelaci vypočtených aktivit různými výpočetními postupy s publikovanými experimentálními daty. Výsledky jsou presentovány od strany 68 a doplněny diskusí od strany 87, kde byly porovnány jednotlivé metodiky. Na straně 94 je publikován stručný závěr a práce je ukončena odkazy na 51 literárních zdrojů převážně publikovaných v angličtině.

#### Připomínky:

Formálními prohřešky jsou případy, když název kapitoly je na posledním řádku na stránce a text pokračuje na nové stránce (str. 23, 43, 45, 52, a další) a název tabulky a vlastní tabulka je na další stránce (str. 59, a další), čemuž se dalo předejít reorganizací textu bakalářské práce ve finální fázi.

Využití plochy u obrázků 12-14 mohlo být efektivnější, tak, jak je tomu u jiných obrázků. Str. 84, Obr. 48 a další: Pokud žlutá přímková v grafu má být směrnice 1, možná by bylo lepší a názornější prezentovat korelace ve formě čtverců nikoliv obdélníků.

Počet překlepů je zcela akceptovatelný, občas se objeví názvoslovný problém, jako např. na str. 87 "s piridinem" nikoliv pyridinem.

#### Otázky:

Bylo by technicky možné kvůli lepší přehlednosti v grafech uvádět k danému bodu číslo sloučeniny?

Lze na základě výsledků navrhnout typově skupinu ze studovaných látek, kterou by bylo možné doporučit k syntéze a následnému testování?

Mělo by smysl u derivátů močovinn, kde se předpokládá důležitá role kyselých vodíků, připravit a testovat například molekuly, kde by místo fragmentů NH byly skupiny NCH<sub>3</sub>? Jsou výsledky srovnání s experimentálními daty publikovatelné v odborném časopise?

Studentka Denisa Kopečná splnila zadané cíle bakalářské práce a proto práci schvaluji k obhajobě.

**Výsledné hodnocení:**

**vyberte hodnocení**

V Hradci Králové dne 30.5.2022

---

Podpis oponenta