

Návrh témat pro dizertační práci v doktorském studijním programu na Farmaceutické fakultě MU

Specifikace formy studia: prezenční

Přesný a plný název programu: Farmakognozie

Pracoviště: Ústav přírodních léčiv

Vedoucí pracoviště: prof. PharmDr. Karel Šmejkal, Ph.D.

Počet stipendijních míst: 1

Téma dizertační práce

Izolace rostlinných sekundárních metabolitů z vybraných rostlinných taxonů (se zvláštním zaměřením na prenylované sloučeniny), jejich strukturní analýza a hodnocení biologické aktivity experimentálně a s pomocí molekulového dokování na vybrané cílové proteinové struktury.

Anotace

Prenylované fenolové sloučeniny jsou unikátní třídou rostlinných sekundárních metabolitů. Tyto přírodní produkty představují kombinaci aromatického skeletu s terpenoidními prvky. Rostliny obsahující prenylované látky se v mnoha zemích tradičně používají jako léčivé. Prenylované látky vykazují širokou škálu biologických účinků, jako jsou protizánětlivé, antioxidační, antimikrobiální nebo protinádorové. Přidání prenylové skupiny do aromatického skeletu může přispět ke zvýšení biologické aktivity běžných fenolických sloučenin. Z hlediska protizánětlivé aktivity tyto sloučeniny inhibují produkci a uvolňování určitých prozánětlivých enzymů a mediátorů, narušují různé prozánětlivé signální dráhy nebo vykazují významný antioxidační účinek.

Téma se soustředí na izolaci sekundárních rostlinných metabolitů, zejména prenylovaných fenolických sloučenin z vybraného rostlinného materiálu. Izolované látky budou identifikovány a bude testována jejich biologická aktivita a porovnán předpokládaný molekulární mechanismus biologické aktivity s modelem vytvořeným in silico s pomocí molekulového dokování. Je předpokládána spolupráce s dalšími pracovišti – zejména Ústavem molekulární farmacie FaF, a ÚVT MUNI.

Předběžné cíle

Předpokládáme izolaci a identifikaci serie prenylovaných i neprenylovaných rostlinných fenolů. Tyto látky budou testovány in vitro zejména v testech protizánětlivé aktivity, a jejich účinek bude ověřován/predikován pomocí in silico metod. Výsledkem budou informace o protizánětlivé aktivitě získaných látek, s ověřením mechanismu efektu na dokovacích modelech. Úspěšné látky mohou postoupit do dalších, zejména in vivo testů.

Návaznost na projektovou podporu

- informace o napojení na grantový projekt: V současné době není grantová podpora.

- informace o dostupnosti úvazku nebo projektového financování (nad rámec stipendia MU): V současné době ne.

Stručné požadavky na studenta dle stávajících požadavků oborové rady

- publikační aktivita: Zkušenosti s publikováním odborných textů a předchozí aktivní účast na konferencích jsou vítány. Student musí být před dokončením studia autorem minimálně 2 prací v časopisu s impakt faktorem (z toho minimálně 1krát prvoautorem práce v časopisu s impakt faktorem).
- informace o povinné zahraniční stáži: Stáž bude realizována cestou programu ERASMUS, v případě úspěchu grantové aplikace pak touto cestou.
- míra zapojení do výuky na fakultě: cvičení z Farmakognozie, vedení diplomové práce jako školitel specialista
- znalost AJ (specifikovat dané nároky): Znalost AJ slovem i písmem je vyžadována (Student se musí umět orientovat v odborné literatuře v AJ).

Informace o školiteli

Jméno a příjmení s tituly: Mgr. Ing. Jiří Václavík, Ph.D.

- publikační aktivita školitele: počet publikací ve Web of Science: 7, h-index: 3
- počet aktuálně vedených doktorských studentů školitele: 0

Funkce na pracovišti

Odborný asistent

Vzdělání a akademická kvalifikace

1999 Farmaceutická fakulta VFU Brno – Farmacie (Mgr.)

2015 Farmaceutická fakulta VFU Brno – Farmakognozie (Ph.D.)

Pedagogická činnost

Cvičení diplomantů

Základy molekulového modelování

Práce s informačními zdroji

Farmakognozie I

Antioxidanty a volné radikály

Antioxidanty a volné radikály – praktická cvičení

Publikační činnost

Therapeutic potential of prenylated stilbenoid macasiamenene F through its anti-inflammatory and cytoprotective effects on LPS-challenged monocytes and microglia

Leláková, V., Béraud-Dufour, S., Hošek, J., ...Blondeau, N., Heurteaux, C.

Journal of Ethnopharmacology, 2020, 263, 113147

Cholinesterase and tyrosinase inhibitory potential and antioxidant capacity of *lysimachia verticillaris* L. And isolation of the major compounds | *Lysimachia verticillaris* L.'nin kolinesteraz ve tirozinaz inhibitör etki potansiyeli ve antioksidan kapasitesi ile ana bileşiklerinin izolasyonu

Özgen, U., Şener, S.Ö., Šmejkal, K., ...Gören, A.C., Žemlička, M.

Turkish Journal of Pharmaceutical Sciences, 2020, 17(5), pp. 528–534

Parallel in vitro and in silico investigations into anti-inflammatory effects of non-prenylated stilbenoids

Leláková, V., Šmejkal, K., Jakubczyk, K., ...Hanáková, Z., Hošek, J.

Food Chemistry, 2019, 285, pp. 431–440

The Chemical Composition of *Achillea wilhelmsii* C. Koch and Its Desirable Effects on Hyperglycemia, Inflammatory Mediators and Hypercholesterolemia as Risk Factors for Cardiometabolic Disease

Khazneh, E., Hibová, P., Hošek, J., ...Legáth, J., Šmejkal, K.

Molecules, 2016, 21(4), 404

C-Geranylated Flavanones from *Paulownia tomentosa* Fruits as Potential Anti-inflammatory Compounds Acting via Inhibition of TNF- α Production

Hanáková, Z., Hošek, J., Babula, P., ...Václavík, J., Šmejkal, K.

Journal of Natural Products, 2015, 78(4), pp. 850–863

An optimised method for the rapid measurement and calculation of radical scavenger profiles in plant extracts by HPLC

Pazourek, J., Václavík, J., Žemlička, M.

Food Chemistry, 2011, 125(2), pp. 785–790

Performance of phased rotation, conformation and translation function: Accurate protein model building with tripeptidic and tetrapeptidic fragments

Pavelčík, F., Václavík, J.

Acta Crystallographica Section D: Biological Crystallography, 2010, 66(9), pp. 1012–1023