

22. července, 2019

Brno

Posudek na habilitační práci

Počítačové metody návrhu a analýzy vybraných bioaktivních látek určených pro léčbu

Mgr. et Mgr. Rafael Doležal, Ph.D.

Univerzita Karlova, Farmaceutická fakulta v Hradci Králové

Habilitační práce Mgr. et Mgr. Rafaela Doležala, Ph.D. nesoucí název „Počítačové metody návrhu a analýzy vybraných bioaktivních látek určených pro léčbu“ je podrobně komentovaným uceleným souborem dvaceti publikovaných článků v ISI indexovaných časopisech. Celkově má habilitace 456 stran, obsahuje několik desítek velmi dobře komentovaných obrázků a cituje 375 publikací ostatních autorů a 46 vlastních prací. Dále velmi kladně hodnotím, z pohledu formálního, že se autor práce rozhodl všech 20 článků okomentovat a umně je spojit v celek.

Práce si klade za cíl využít počítačové technologie (computer aided drug design, CADD) pro návrh a testování léčiv. Vzhledem k atraktivitě daného oboru není přitom překvapením, že autor ukazuje aplikační scénáře pro několik oblastí a to vývoj léčiv proti Alzheimerově nemoci (Alzheimer's diseases, AD), narkolepsii a výzkumu reaktivátorů cholinesteras inhibovaných bojovými chemickými látkami nebo pesticidy ze skupiny organofosforových látek.

Jedná se o velmi aktuální témata, která jsou zpracována do hloubky. Práce dr. Doležala významnou měrou přispívá k rozvoji a především aplikacím CADD. Po formální stránce je práce zpracována velmi dobře. Vyskytují se v ní pouze ojedinělé prohřešky proti stylistice a minimum překlepů, formální i obsahová úroveň obrázků je vynikající včetně již výše zmíněného komentáře k publikacím. K práci samotné mám následující dotazy:



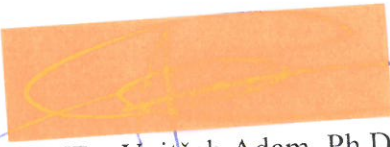
Vojtech Adam, Ph. D.
Professor
Head of Department of Chemistry and Biochemistry
Mendel University in Brno
Phone: +420 545 133 350
Email: vojtech.adam@mendelu.cz
<http://ucb.af.mendelu.cz/>

Univerzita Karlova	6451
Přijato: 26.07.2019 v 09:13:33	Odbor
Č.j.: UKFaF/228900/2019	Zprac.
Č.dop.:	
Listů: 4 Příloh: 2	
Druh: písemné	



- Co má vystihovat červená oblast v Obr. 2?
- Mohly by CADD sloužit také pro výzkum vzniku neurodegenerativních onemocnění?
- Je spojení počítačový expert, organický chemik a biolog běžné při stavbě týmů navrhujících léčiva? Z kterého vědního oboru přichází první impuls pro vývoj léčiva?
- Na základě Vašich zkušeností kdy bude možné nahradit *in vivo* testování pomocí CADD?

Vzdor výše uvedeným dotazům se jedná o velmi dobrou práci, která shrnuje dílo významným způsobem posunující naše znalosti. Hlavní přínos spatřuji v rozvoji počítačových metod, které významně přispívají k dalšímu rozvoji řady vědních disciplín. Z těchto důvodů habilitaci Mgr. et Mgr. Rafaela Doležala, Ph.D. doporučuji k obhajobě.



Prof. RNDr. Vojtěch Adam, Ph.D.
Ústav chemie a biochemie
Mendelova univerzita v Brně