

Příloha A - vyjádření školitele, zda disertační práce splňuje požadavky potřebné pro její obhájení (obsáhleji na A4 na samostatném dokumentu)

Disertační práce Václava Bazgiera se zabývá molekulárním dokováním nově navržených ligandů odvozených od růstových regulátorů do vazebných míst enzymů a receptorů, např. do cyklin-dependentní kinázy, cytokininových receptorů, sodno-draselné pumpy a mnoha dalších. V úvodní části se autor věnuje vzhledu do problematiky molekulárního dokování, definicím základních pojmů a následně klasifikaci jednotlivých skórovacích funkcí. Součástí teoretického úvodu je také popis základního molekulárně dokovacího schématu a dále postupy, jak správně připravit struktury pro jednotlivé ligandy a receptory. V závěru teoretické části jsou shrnuty molekulárně dokovací přístupy a metodiky. Výsledková část je koncipována jako soubor autorových prvoautorských či spoluautorských publikací, jež jsou zde podrobně diskutovány v jednotlivých kapitolách řazených dle dokovacích přístupů.

V rámci této disertační práce autor aplikoval celou řadu molekulárně-dokovacích přístupů, které přispěly k objasnění mechanismů interakcí navrhovaných ligandů se studovanými receptory či enzymy a dopomohly k lepšímu a komplexnějšímu popisu mechanismu vazby studovaných molekul do aktivních míst vybraných struktur. V několika případech napomohlo molekulární dokování ke směřování vědeckých cílů jako například při studiu brasinosteroidního receptoru. Součástí této práce je rovněž nově navržená skórovací funkce programu DOCK, která je schopna vylepšit získanou interakční energii mezi ligandem a receptorem. Skórovací funkce je v tomto případě upravená ve své repulsní části, která je v práci exaktně uvedena ve formě rovnice, implementována a otestována.

Kromě publikací uvedených v rámci této disertační práce se Mgr. Václav Bazgier podílel také na přípravě dalších publikací v impaktovaných časopisech jako spoluautor (seznam publikací str. 49).

Na základě výše uvedených informací doporučuji disertační práci k obhajobě.

V Olomouci, dne 24. dubna 2018

Prof. Ing. Miroslav Strnad, DSc.

Univerzita Palackého v Olomouci &
Ústav experimentální botaniky AV ČR, v. v. i.
LABORATOŘ RŮSTOVÝCH REGULÁTORŮ
Slechtitelů 27, 783 71 Olomouc
tel: 585 634 850-1 fax: 585 634 870
email: rustreg@upol.cz www.rustreg.upol.cz