

STANOVISKO HABILITAČNÍ KOMISE

K návrhu na jmenování uchazeče

M.Sc. Pavlo POLISHCHUK, Ph.D.

docentem pro obor Fyzikální chemie

na Přírodovědecké fakultě Univerzity Palackého v Olomouci

Složení komise:

Předseda:

prof. RNDr. Pavel Anzenbacher, DrSc.
(*Lékařská fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci*)

Členové:

prof. RNDr. Karel Berka, Ph.D.
(*Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci*)

prof. RNDr. Jiří Vondrášek, CSc.
(*Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v. v. i., Praha*)

prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.
(*Fakulta chemické technologie, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze*)

doc. RNDr. Radka Svobodová, Ph.D.
(*Přírodovědecká fakulta, Masarykova univerzita, Brno*)

STANOVISKO HABILITAČNÍ KOMISE:

Na základě předložených materiálů, posudků oponentů a veřejně přístupných databází vydává habilitační komise následující stanovisko:

Pan **M.Sc. Pavlo Polishchuk, Ph.D.**, narozen 29. července 1979 v Oděse, se ve své odborné specializaci dlouhodobě profiluje v oblasti chemoinformatiky, výpočetní chemie a aplikace metod strojového učení (Machine Learning) při modelování složitých chemických a biologických systémů. Komise s uznáním konstatuje, že uchazeč již v minulosti získal prestižní titul HDR (Habilitation à diriger des recherches) na Univerzitě ve Štrasburku ve Francii, což svědčí o jeho mezinárodním vědeckém renomé.

Odborný životopis uchazeče:

Vysokoškolské vzdělání zahájil na Oděské národní univerzitě na Ukrajině, kde v roce 2001 získal magisterský titul v oboru chemie. Následně pokračoval v doktorském studiu na Fyzikálně-chemickém institutu A. V. Bogatského Národní akademie věd Ukrajiny v Oděse, které úspěšně zakončil v roce 2009 obhajobou disertační práce a získal titulu Ph.D. v oboru bioorganické chemie. V roce 2024 úspěšně završil řízení na Univerzitě ve Štrasburku a získal titul Dr. Habilitatus (HDR) v oboru chemie a chemoinformatiky. Profesně je dr. Polishchuk úzce spjat s Univerzitou Palackého v Olomouci, kde působí od roku 2015. Od srpna 2022 zastává pozici vedoucího výzkumné skupiny Chemoinformatiky a návrhu léčiv (Chemoinformatics and drug design) v Ústavu molekulární a translační medicíny při Lékařské fakultě UP v Olomouci.

Pedagogická činnost a školení studentů:

Dr. Polishchuk se podílí na výuce ve všech stupních studia na Přírodovědecké a Lékařské fakultě UPOL. Konkrétně je kandidát úspěšným školitelem a mentorem studentů v rámci jejich Erasmus+ a jiných stáží (3), jedné diplomové práce na UP a mentorem dalších prací na dalších zahraničních univerzitách ve Francii, Ukrajině a Moldavě. Na UP byl školitelem jedné úspěšně obhájené disertační práce a v současné době 3 doktorské práce vede.

Přednáší a vede cvičení v předmětech zaměřených na chemoinformatiku a metody hledání léčiv pomocí farmakoforů a metod založených na ligandech již od roku 2017 a to v předmětech

- Racionální návrh léčiv (KFC-DD)
- Advanced in silico Drug Design (KFC-ADD)

V rámci druhého předmětu je současně od roku 2017 spoluorganizátorem série každoročních mezinárodních workshopů Advanced in silico Drug Design Workshop, jejíž 9. verze proběhla v lednu 2026 a zúčastnilo se jí přes 600 účastníků z 90 zemí, z toho 80 na místě a dr. Polishchuk při ní připravil soutěž, kde účastníci vybírali aktivní molekuly z předchystaného datasetu.

Vědecko-výzkumná činnost:

Kandidát vykazuje mimořádně silnou a konzistentní publikační aktivitu v prestižních mezinárodních časopisech zaměřených na chemoinformatiku a výpočetní chemii. Na řadě publikací, které tvoří jádro předkládané habilitace, figuruje jako první nebo korespondující autor.

Dr. Polishchuk je autorem či spoluautorem 63 původních vědeckých prací (z toho 20x coby první či korespondující autor). Jeho práce mají významný mezinárodní ohlas, což dokládají více než 1 600 citací (dle WOS, s vyloučenými autocitacemi) a h-index je 22. Vyzdvihnout si zaslouží i vysoce citované práce v oborových časopisech, kde vysoce převyšují očekávatelný ohlas:

- **Polishchuk P**, Madzhidov TI, Varnek A: Estimation of the size of drug-like chemical space based on GDB-17 data. JOURNAL OF COMPUTER-AIDED MOLECULAR DESIGN 2013, 27(8), pp.675-679 (IF = 3.1, 427 citací)
- **Polishchuk P**: Interpretation of Quantitative Structure Activity Relationship Models: Past, Present, and Future. JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING 2017, 57(11), pp.2618-2639 (IF = 5.3, 177 citací)
- Li F, ... ,**Polishchuk P**, ... , Schapira M: CACHE Challenge #1: Targeting the WDR Domain of LRRK2, A Parkinson's Disease Associated Protein. JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING 2024, 64(22), pp. 8521–8536 (IF = 5.3, 21 citací)

Kandidát zcela splňuje orientační scientometrická kritéria pro habilitační řízení (viz níže). Dr. Polishchuk je spoluautorem kapitol v pěti monografiích (4x Springer a 1x Humana Press). Dále je autorem či spoluautorem více než 100 příspěvků na odborných vědeckých konferencích.

Významným a nezpochybnitelným přínosem dr. Polishchuka je jeho přesah do aplikační sféry a poskytování výpočetních nástrojů komunitě. Podílí se na vývoji volně dostupných softwarových balíčků a skriptů (např. framework EasyDock), udržuje četné GitHub repozitáře (např. nástroje SPCI, CREM, či EasyDock) a také aktivně zapojuje své nástroje do infrastruktury ELIXIR CZ - např. SPCI.

Dr. Polishchuk je úspěšný i v získávání a řešení grantových projektů. Byl hlavním řešitelem projektu INTER-EXCELLENCE (LTARF18013; *“Improve the output of primary screening of biologically active compounds using computational models”* (300 000 EUR) s výborným hodnocením V dle CEP) a druhý projekt INTER-EXCELLENCE II aktuálně řeší (LUAUS23262; *“De novo design of synthetically feasible compounds guided by artificial intelligence”* (470 000 EUR)).

Recenzní činnost Dr. Polishchuka je taktéž rozsáhlá - kromě oponování dvou doktorských prací sloužil jako recenzent pro široký výběr impaktovaných mezinárodních odborných časopisů, např. Journal of Cheminformatics, Molecular Informatics, Journal of Chemical Information and Modeling, Journal of Medicinal Chemistry, atd. Rovněž působil jako guest editor v časopise Pharmaceuticals pro speciální číslo *“Pharmacophore Modeling and Applications in Drug Discovery: Challenges and Recent Advances“*.

Zahraniční stáže a pobyty:

Dr. Polishchuk byl také zvaným výzkumníkem v Laboratoři cheminformatiky na Universitě ve Strasbourgu v letech 2011–2012. Výzkumná činnost byla zaměřena na QSAR modelování chemických vlastností.

Ocenění a stipendia:

- 2009-2011 – Stipendium pro mladé vědce od Národní akademie věd Ukrajiny
- 2012 – Stipendium Francouzské ambasády na Ukrajině pro mladé vědce.
- 2013 – Vítěz soutěže o inovativní projekt INVAC vyhlášené Odeským inovativním informačním centrem za projekt "New approach of development of inhibitors of platelet aggregation which are promising cardiovascular drugs".
- 2021, 2024 – Cena děkana – Lékařská fakulta UPOL, za významnou publikační činnost
- 2024 – 2. místo v mezinárodní soutěži CACHE Challenge #1 na výběr látek cílicích na WDR doménu proteinu LRRK2 asociovaného s Parkinsonovou chorobou (viz výše).

Habilitační práce:

Habilitační práce s názvem "**New methodologies of Machine-Learning modeling of complex chemical systems: mixtures, reactions and ligand-protein complexes**" je sepsána v anglickém jazyce formou ucelené, dobře strukturované monografie. Práce chronologicky a logicky shrnuje výzkum dr. Polishchuka od reprezentace molekulárních systémů, predikce vlastností, interpretace QSAR modelů (např. Universal Interpretation Approach), až po návrh bioaktivních molekul a virtuální screening.

Práce byla posouzena třemi nezávislými oponenty:

- **doc. David Hoksza, Ph.D.** (Matematicko-fyzikální fakulta, Univerzita Karlova)
- **doc. Mgr. Ing. Karel Sedlář, Ph.D.** (Fakulta elektrotechniky a komunikačních technologií, VUT v Brně)
- **doc. RNDr. Petr Jurečka, Ph.D.** (Přírodovědecká fakulta, Univerzita Palackého v Olomouci)

Všichni tři oponenti hodnotí práci vysoce pozitivně. Oponenti shodně vyzdvihují systematickosti výzkumu, vysokou míru komplexity, přínos pro obor cheminformatiky a bezvadné zpracování práce. Kladně hodnotí zejména to, že vyvíjené metody nezůstávají pouze teoretickým konceptem, ale jsou aktivně využívány a sdíleny s vědeckou komunitou. Všichni oponenti ve svých posudcích jednoznačně konstatují, že **práce splňuje požadavky kladené na habilitační práce a doporučují její přijetí a pokračování v habilitačním řízení.**

Naplnění doporučujících kritérií Vědecké rady Přírodovědecké fakulty UP v Olomouci:

	Doporučení VR PřF UPOL	Dr. Polishchuk
Počet publikací ve vědeckých periodikách (vědecké časopisy/práce ve sbornících)	20 (z toho minimálně 10 jako první nebo korespondující autor)	63 (20)
Počet monografií(monografie a kapitoly v monografiích)	0-2	5
Citace ve vědeckých časopisech (WOS)	20 (bez autocitací vlastních i spoluautorských)	1622
Soustavná pedagogická práce na VŠ	5 let	8 let

WOS stav k 11.3.2026

Hlasování habilitační komise:

V tajném hlasování, prostřednictvím online nástroje „anketa.upol.cz“, bylo přijato usnesení navrhnout Vědecké radě PřF UP v Olomouci jmenování M.Sc. Pavlo Polishchuka, Ph.D. docentem pro obor Fyzikální chemie. Tajného hlasování se zúčastnilo 5 členů komise. Bylo odevzdáno 5 hlasů, z čehož bylo 5 kladných hlasů, žádný záporný hlas a nikdo se nezdržel hlasování (protokol o hlasování je přílohou tohoto stanoviska).

Závěr:

Habilitační komise po prostudování všech materiálů zhodnotila vědeckou, publikační i pedagogickou činnost uchazeče. Komise konstatuje, že M.Sc. Pavlo Polishchuk, Ph.D., je zralou vědeckou osobností s jasnou vizí a významným mezinárodním přesahem, která plně prokazuje způsobilost k samostatné i týmové vědecké a pedagogické práci na úrovni docenta. Komise konstatuje, že M.Sc. Pavlo Polishchuk, Ph.D. splňuje požadavky uvedené v Řádu habilitačního řízení a řízení ke jmenování profesorem na Univerzitě Palackého v Olomouci a § 72 zákona č.111/1998 Sb. O vysokých školách. **Habilitační komise navrhuje Vědecké radě Přírodovědecké fakulty UP v Olomouci jmenování M.Sc. Pavla Polishchuka, Ph.D., docentem pro obor Fyzikální chemie.**

V Olomouci dne 31.3.2026

prof. RNDr. Pavel Anzenbacher, DrSc.
prof. RNDr. Jiří Vondrášek, CSc.
doc. RNDr. Radka Svobodová, Ph.D.

prof. RNDr. Karel Berka, Ph.D.
prof. Mgr. Daniel Svozil, Ph.D.



[Hlavní strana](#) [Koncepty](#) [Ankety](#) [Manuál](#)

[Výsledky](#) [Respondenti](#) [Otázky](#) [Přílohy](#)

Hlasování 'Doporučení habilitační komise: Pavlo Polishchuk'

Skupina hlasování: **Hlasování_17.03.2026_834e2**

Počet odpovědí: 5

Neodpovědělo: 0

Habilitační komise navrhuje vědecké radě PíF UP v Olomouci jmenování Ms.C. Pavlo Polishchuka docentem pro obor Fyzikální chemie

ANO	5 hlasů
NE	0 hlasů
ZDRŽEL(A) SE	0 hlasů

[Výsledky](#) [Respondenti](#) [Otázky](#) [Přílohy](#)

Hlasování 'Doporučení habilitační komise: Pavlo Polishchuk'

Skupina hlasování: **Hlasování_17.03.2026_834e2**

Výsledky ankety 'Doporučení habilitační komise: Pavlo Polishchuk' budou dostupné, až ji vyplní alespoň 51% respondentů

Stav: Vyhodnoceno

Hlasování je tajné: Ano
Rozesílat e-maily respondentům: Ano
Podporuje komentáře: Ne
Další správci hlasování: pavel.anzenbacher@upol.cz
Počet odpovědí: 5 (100,00%)
Zbývá odhlasovat: 0

Respondenti

Vytvořeno	Respondent ↑	Vyplněno	Notifikován	Váha hlasu	Akce
1. 28.03.2026 00:14:33	daniel.svozil@vscht.cz	Ano	30.03.2026 13:13	1	Odkaz respondenta
2. 28.03.2026 00:14:33	jiri.vondrasek@uochb.cas.cz	Ano	31.03.2026 09:53	1	Odkaz respondenta
3. 28.03.2026 00:14:33	karel.berka@upol.cz	Ano	28.03.2026 00:14	1	Odkaz respondenta
4. 28.03.2026 00:14:33	pavel.anzenbacher@upol.cz	Ano	28.03.2026 00:14	1	Odkaz respondenta
5. 28.03.2026 00:14:33	radka.svobodova@ceitec.muni.cz	Ano	30.03.2026 13:13	1	Odkaz respondenta