



Oponentský posudek doktorské disertační práce

Luboš VRBKA: Theoretical Study of Ions at Phase Interfaces

Doktorská disertační práce RNDr. Luboše Vrbky je tvořena cca 40 stranami shrnujícího textu a zbývající část obsáhlého díla tvoří kopie publikací autora, bezprostředně se vztahujících k tématu práce. Úvodní text je napsán srozumitelně a je logicky seřazen do čtyř tématicky odlišných kapitol. V první se autor zabývá teoretickými základy používaných výpočetních metod a technik, především molekulární dynamiky včetně problematiky polarizace a podmínek periodického boxu. V dalších třech kapitolách autor představuje vlastní výsledky rozdělené do tří velkých skupin: Ions at the air/water interface, Ions at the ice/water interface a Ions at the protein/water interface. Na začátku každé kapitoly je úvod do problematiky, následuje souhrn vlastních výsledků k danému tématu. Na konci celého úvodního textu je souhrn celé práce, který dává přiložené publikace do souvislosti, což je zároveň příjemný úvod pro čtenáře, než začíná prohlížet přiložené publikace. Angličtina je na dobré úrovni bez větších chyb a typického střeoevropského „přízvuku“.

Ve své práci se RNDr. Luboš Vrbka zaměřil na studium iontů na fázových rozhraních. Spojovací nití jsou přitom vlastnosti iontů určené metodou molekulární dynamiky, zároveň se pracuje s potenciály polarizovatelnými a nepolarizovatelnými. První část týkající se fázového rozhraní vzduch/voda se zabývá solvatačními vlastnostmi různých organických a anorganických iontů. Přitom bych zdůraznil důležitost práce tím, že přítomnost anorganických iontů na fázovém rozhraní vzduch/voda má nezanedbatelné konsekvence pro několik technologických a atmosférických procesů. V druhé části práce se podařilo sestavit systém, který umožňuje sledovat mrznutí vody pomocí molekulární dynamiky a tím pádem bylo možné poprvé simulovat velice důležitý přírodní proces tzv. brine rejection na počítači. Téma disertační práce týkající se fázového rozhraní protein/ionty (třetí část) je vysoce aktuální a výsledky doktoranda, kde popsal preferovanou adsorpci sodíkových iontů nad draslíkovými k proteinovým povrchům, nejsou zajímavé jen z hlediska výpočetní chemie na proteinech, ale mohou dát i důležité impulsy v oblasti proteinové biochemie a iontového transportu.

Jádro práce tvoří deset publikací v mezinárodních recenzovaných časopisech (z 13 publikací autora uvedeno na WOS). Impaktové faktory těchto časopisů jsou poměrně vysoké, jedna publikace dokonce nad IF 10 (PNAS). Na 8 publikacích je RNDr. Luboš Vrbka prvním autorem. Celkem posbíral autor už 65 citací (podle WOS 30.1.2007), což je pro doktoranda, který publikoval svou první práci před třemi lety, úctyhodný výkon.

Na doktoranda bych se obrátil s otázkou ohledně voleného modelu vody. RNDr. Luboš Vrbka studoval ve své práci fázové rozhraní Protein/ionty a používal k tomu vodu SPC/E. Existuje ovšem celá řada různých modelů vod jako např. F3C, SPC, SPC/E, TIP3P, TIP4P, některé popisující lépe fyzikální vlastnosti vody ovšem na úkor silného podceňování

interakcí se solutem, a obráceně. Proč byl vybrán použitý model vody a jak by dopadly výpočty s jinými modely vod?

Na závěr lze shrnout, že RNDr. Luboš Vrbka vykonal až dosud velmi kvalitní vědeckou práci, a hlavně úspěšnou a mezinárodně hodnocenou. Publikace shromážděné v této doktorské disertační práci a jejich citovanost ukazují mimo veškerou pochybnost odborné kvality doktoranda. **Předložená práce svou kvalitou splňuje nároky na doktorskou disertační práci a plně ji doporučuji k přijetí v rámci řízení ke jmenování RNDr. Luboše Vrbky doktorem.**

V Nových Hradech, 30. ledna 2007

Doc. RNDr. Rüdiger H. Ettrich, Ph.D.

*Laboratoř náročných výpočetních technik
Ústavu systémové biologie a ekologie
Akademie věd České republiky*