

2 Autoreferát v českém jazyce

Předkládaná práce sestává z deseti publikací¹⁻¹⁰ v mezinárodních recenzovaných časopisech, doplněných rozšířeným úvodem a diskusí získaných výsledků. Studovanou tematiku je možné rozdělit do tří skupin, jejichž společným jmenovatelem je chování iontů na fázových rozhraních. V práci se zabýváme

- ionty na rozhraní voda/vzduch

Některé anorganické ionty se mohou, v rozporu s obecně přijímanými teoriemi, akumulovat na rozhraní voda/vzduch. Jedná se zejména o velké polarizovatelné anionty, např. jodidový, azidový, nebo thiokyanátový. U organických kationtů s alifatickými řetězci je důvodem k akumulaci na rozhraní jejich hydrofobicita. Rovnováha mezi hydratačními a polarizačními silami v komplexních iontových roztocích je detailně diskutována v této části disertační práce.

- ionty na rozhraní voda/led

Vypuzování soli z mrznoucích slaných roztoků (např. z mořské vody) je důležitý přírodní děj, který ovlivňuje globální klima. Metodami molekulové dynamiky jsme studovali mechanismus tohoto procesu na atomární úrovni.

- ionty na rozhraní voda/protein

Ve dvou různých studiích jsme se zabývali specifickými interakcemi mezi proteiny a ionty. Nejdříve diskutujeme vliv iontů na aktivitu enzymu křenové peroxidázy. Druhý projekt poskytl vysvětlení faktu, že sodné kationty jsou v blízkosti proteinů preferovány před ionty draselnými.

Výsledky této práce byly většinou získány analýzou molekulové dynamických (MD) simulací. V případě vytváření nových potenciálů jsme používali i metody kvantové chemie. Prezentované výstupy jsou často kombinací teoretických a experimentálních technik, detailní popis experimentů je však mimo rozsah této práce. Experimentální výsledky jsou tak jen stručně shrnuty, aby zasadily teorii do širších souvislostí.