



Vyjádření školitele k odevzdané disertační práci

Název: Molecular modeling of biomolecules – surface interactions
Student: Ing. Ondřej Kroutil
Obor: Biofyzika
Školitel: doc. RNDr. Milan Předota, Ph.D.

Ondřejem Kroutila jsem poznal jako vědeckého pracovníka Zdravotně sociální fakulty JU řešícího problematiku interakce oligonukleotidů s nabitým povrchem, v rámci projektu, na kterém jsem se také malou měrou podílel. Následně se přihlásil k doktorskému studiu biofyziky na PŘF JU a započala naše spolupráce školitel-student a spolupráce na řešení grantových projektů, jichž jsem byl hlavním řešitelem. Současně však Ondřej pracoval na dalších vědeckých projektech řešených na ZSF JU (řešitel dr. Zdeněk Chval) a nyní MFF UK (řešitel prof. Jaroslav Burda), což jej nepochybně odborně obohatilo, ale někdy vedlo k delší době od začátku řešení problému do publikování výsledků.

Rozsah jeho aktivit je bohatý co do studovaných systémů (jak je patrné z disertační práce), tak metodami zkoumání. Zejména oceňuji, že ovládl jak metody kvantové mechaniky, tak molekulární dynamiky i ab initio molekulární dynamiky, přičemž pouze u druhé zmíněné jsem mu mohl předávat své zkušenosti. Je tedy zřejmé, že na jeho pokrocích a výsledcích mají podíl i další kolegové uvedení v poděkování v disertační práci, ale hlavně Ondrova snaha uchopit problémy z více stran a produkovat výsledky, které v ideálním případě poskytují klasickou molekulární dynamikou, ověřenou kvantovými výpočty, výsledky obohacující experimentální poznání.

Hlavním směrem, který jsem inicioval, bylo zkoumání interakcí iontů a molekul s křemenným povrchem v širokém rozsahu hodnot pH, což vyžadovalo vyvinutí modelu nabitého povrchu. Publikování těchto výsledků naráželo na kritiku posuzovatele, vedlo k detailnějšímu porovnání našeho silového pole s mezitím vyvinutým alternativním silovým polem prof. Heinze a vyústilo v nesoulad mezi jím publikovanými výsledky a Ondrovými výsledky s použitím stejné parametrizace. Konečné publikování článku a následná errata prof. Heinze děkující Ondrovi za odhalení chyb jsou satisfakcí, ale i zkušeností, že život vědce není vždy snadný.

Modelování rtuťových povrchů a spolupráce s moravskými experimentátory vzniklo z podnětu doc. Martina Kabeláče a Ondřeje Kroutila – můj vliv zde je minimální.

Podrobné hodnocení jednotlivých částí disertační práce a přínosu publikovaných článků přenechávám oponentům. Rád však vyzdvihávám týmového ducha O. Kroutila, kdy (někdy na úkor vlastních výsledků) ochotně seznamoval nejen mne, ale i další studenty a kolegy, s čerstvě nabitými dovednostmi, které s úspěchem používáme.

Souhrnem: Ondřej Kroutil svým vědeckým přínosem shrnutým v disertační práci, jakož i publikovanými výsledky (včetně těch, které nejsou obsaženy v disertační práci) prokázal, že se velmi aktivně zapojil do vědeckého života a přináší zajímavé poznatky, které pomocí počítačového modelování objasňují mechanismy, které jsou obtížně dostupné experimentálně. Dle mého názoru bohatě splnil požadavky kladené na studenta doktorského oboru biofyzika. Jednoznačně podporuji, aby mu byl udělen titul Ph.D.

doc. RNDr. Milan Předota, Ph.D.

11. 7. 2017