

# Abstrakt

Simulace molekulární dynamiky mohou poskytnout detailní informace o biologických systémech. Nicméně klasická silová pole, která nezohledňují elektronovou polarizaci atomů, nejsou schopná dostatečně přesně reprodukovat interakce mezi biologickými membránami a nabitými částicemi, jako jsou ionty. V této práci zahrneme efekt chybějící elektronové polarizace do silového pole CHARMM36 pro fosfatidylcholinové lipidy. Tato implementace bude provedena pomocí aproximace středního pole za využití modelu elektronového kontinua (ECC). Správnou sílu interakcí mezi ionty a membránou odvozujeme na základě tzv. konceptu elektrometru, který dává do souvislosti změnu v parametrech uspořádání v cholinové části lipidů s množstvím náboje, který je přítomen na povrchu membrány.

Klíčová slova: fosfatidylcholin, vápenaté ionty, sodné ionty, model elektronového kontinua, koncept elektrometru

Práce je anglicky