

# Opravný lístek k bakalářské práci.

Autor: Jakub Martinka

Název: Studium přístupových cest naftalenu do cytochromu P450 1A2.

1. **Strana 16 a 20, slovní spojení:** „Interakční useknutí, z angl. cutoff“

**Nahrazeno:** „Interakční cutoff“

2. **Strana 12, věta:** „V kvantové chemii se díky Bornově-Oppenheimerově aproximaci zavádí hyperplocha potenciální energie, což je funkce popisující závislost elektronové energie na souřadnicích jader.“

**Nahrazena větou:** „V kvantové chemii se díky Bornově-Oppenheimerově aproximaci zavádí hyperplocha potenciální energie, což je funkce popisující závislost potenciální energie na souřadnicích jader.“

3. **Strana 13, rovnice:**

$$U_{torze}(\Phi) = \sum_{torze} \frac{K_{\Phi,i}}{2} (1 + \cos(n_i \Phi_i - \Phi_{i,0}))^2$$

**Nahrazena rovnicí:**

$$U_{torze}(\Phi) = \sum_{torze} \frac{K_{\Phi,i}}{2} (1 + \cos(n_i \Phi_i - \Phi_{i,0}))$$

4. **Strana 14, věta:** „Van der Waalovy interakce zahrnují interakce mezi permanentními/indukovanými dipólovými momenty, disperzní síly mezi nepolárními molekulami a také překryvové interakce, kdy při dostatečné blízkosti atomů dochází k překryvu orbitalů a vzniku velkých repulsních sil.“

**Nahrazena větou:** „Van der Waalovy interakce zahrnují interakce mezi permanentními/indukovanými dipólovými momenty, disperzní síly a také překryvové interakce, kdy při dostatečné blízkosti atomů dochází k překryvu orbitalů a vzniku velkých repulsních sil.“

5. **Strana 14, věta:** „Van der Waalovy interakce souhrnně popisuje Lennardův-Jonesův potenciál, vyjádřený rovnicí (9), kde  $r_{ij}$  udává vzdálenost páru atomů,  $\epsilon_{ij}$  je hloubka minima,  $\sigma_{ij}$  je kolizní průměr ( $\sigma_{ij} = 2^{-1/6} r_0$ , kde  $r_0$  je průměr atomu).“

**Nahrazena větou:** „Van der Waalovy interakce souhrnně popisuje Lennardův-Jonesův potenciál, vyjádřený rovnicí (9), kde  $r_{ij}$  udává vzdálenost páru atomů,  $\epsilon_{ij}$  je hloubka minima,  $\sigma_{ij}$  je kolizní průměr ( $\sigma_{ij} = 2^{-1/6} r_0$ , kde  $r_0$  je rovnovážná vzdálenost).“