

## Abstrakt

Nukleové kyseliny (NA) jsou biochemické makromolekulární látky, nezbytné pro všechny živé organismy – jejich funkcí je uchovávání genetické informace a řízení procesů syntézy bílkovin. Nukleové kyseliny jsou složeny z polynukleotidových řetězců a podle složení těchto nukleotidů rozlišujeme dva základní druhy nukleových kyselin: DNA (Deoxyribonukleová kyselina) a RNA (Ribonukleová kyselina). Na základě vnitřní nukleotidové sekvence, a i vlivem vnějších interakcí se tyto řetězce formují do různých prostorových konformací. Na úrovni dinukleotidů jsou tyto konformace popisovány a klasifikovány tzv. třídami dinukleotidových konformerů – NtC.

Pro odhalení trojdimenzionálních struktur biologických makromolekul se již přes 50 let používá především metoda rentgenové krystalografie. Principem této metody je interakce rentgenových paprsků s elektronovým oblakem atomů v krystalu. Na základě elektronové hustoty se poté určují atomové pozice. Při rozlišení dostupném u většiny makromolekulárních krystalů však nejsou tyto krystalografická data dostatečná k tomu, aby bylo možné odvodit chemicky přijatelnou strukturu, proto se používají stereochemická omezení.

Stereochemické standardy jsou slovníky popisující konkrétní délky vazeb, úhly vazeb, torzní úhly, roviny a chiralitu. Pomocí těchto hodnot se zdokonalují a upravují strukturální modely makromolekul. Na základě dat získaných ze strukturálních databází jsme studovali nejnovější verzi těchto stereochemických standardů.

**Klíčová slova:** struktura NA, konformace NA, stereochemické standardy, strukturální databáze, CSD, PDB