

5 Závěr

V části ia) prezentované práce jsme porovnali stabilitu a molekulovou interakci mezi adeninem...tyminem, guaninem...cytosinem a jejich metylovanými analogy s malým počtem molekul vody a organických rozpouštědel (CH_3OH , DMSO a CHCl_3).

Pozorovali jsme odlišné interakce mezi bázemi a studovanými solventy. Zatímco voda a CH_3OH stabilizují S struktury párů bází větším počtem vodíkových vazeb než je možno v HB strukturách, CHCl_3 molekula nemá tuto vlastnost a jsou preferovány HB struktury s molekulami rozpouštědla nad a pod rovinou bází. DMSO molekula je jedinečná svou velikostí ve srovnání s ostatními rozpouštědly a mezi páry bází s DMSO rozpouštědlem jsou nejvíce zastoupené jsou T struktury.

V části ib) prezentované práce jsme dospěli k několika závěrům založeným na MD, SCC-DFTB-D a COSMO výpočtech:

- i) nahrazení nukleové báze modifikovanou nukleobází **X** vede převážně ke strukturálním změnám centrálního páru (patrové uspořádání centrálního modifikovaného páru). Pouze s nejmenšími modifikovanými nukleobázemi **P**, centrální pár bází (**A-P**, **P-T** a **P-P**) zustane planární. V případě **B-T**, **A-B** nebo **D-D** ve specifické orientaci je jedna z modifikovaných bází **X** vytlačena ven z DNA duplexu.
- ii) Se stoupající aromaticitou modifikovaných nukleobází **X** roste stabilita patrového uspořádání
- iii) Nejvyšší selektivita mezi všemi studovanými analogy bází byla nalezena pro modifikovanou nukleobázi **D**

Ve druhé části prezentované práce jsme použili pro výpočty redukčních potenciálů derivátů nukleobází spojených s komplexy přechodných kovů (Ru^{2+} , Os^{2+}) DFT a COSMO metody a srovnali jsme naše výsledky s experimentálními hodnotami. Pozorovali jsme, v případě Ru^{2+} komplexů vypočítané redukční potenciály souhlasí s experimentálními hodnotami, zatímco v případě Os^{2+} komplexů nesouhlasí. Toto může být vysvětleno zanedbáním spin-orbitální vazby v našich výpočtech, která v Os^{2+} komplexech hraje více podstatnou roli než v Ru^{2+} . Interpretace vypočtených redukčních potenciálů byla více komplikovaná, ale obecně lze říci, že vypočítaná data byla v oblasti experimentálních hodnot.

Všech šest originálních prací, které kompletují tuto dizertační práci je přiloženo v Přílohách v dizertační práci.