

**Název:** Strukturní interpretace NMR spektroskopických parametrů v nukleových kyselinách

**Autor:** Mgr. Jiří Fukal

**Vedoucí:** Dr. Vladimír Sychrovský

**Instituce:** Univerzita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta a Akademie věd České republiky, Ústav organické chemie a biochemie

**Abstrakt:**

Nukleární magnetická rezonance (NMR) je spektroskopická technika široce používaná v mnoha oblastech moderního výzkumu. NMR spektroskopie je nepostradatelná při určování chemické a 3D struktury molekul. Zejména  $^1\text{H}$  a  $^{13}\text{C}$  NMR měření se staly základním nástrojem pro charakterizaci peptidů, proteinů a nukleových kyselin.  $^{15}\text{N}$  a  $^{17}\text{O}$  NMR experimenty většinou vyžadují zavedení těchto atomů/izotopů na příslušná místa v molekulách z důvodu jejich nízkého přirozeného zastoupení a tedy i nižší citlivosti měření. Měření  $^{31}\text{P}$  NMR spekter se tedy nabízí jako velmi vhodná vzhledem ke 100 % přirozeného zastoupení tohoto izotopu.  $^{31}\text{P}$  NMR studie nukleových kyselin se přirozeně zaměřují na fosfátovou skupinu páteře. Příslušné spektrální parametry zahrnují zejména  $\delta_{31\text{P}}$  NMR chemický posun a  $J$  spin-spin konstantu související s chemickou vazbou zahrnující atom fosforu (např.  $^3J_{\text{P,H}3'}$ ). Pro teoretické výpočty  $^{31}\text{P}$  NMR parametrů je nutné použít adekvátní kvantově mechanickou metodu (QM metodu) a zahrnout efekty v důsledku molekulové dynamiky (MD). Interpretace  $^{31}\text{P}$  NMR spekter je z těchto důvodů výpočetně velice náročná. Kalibrace QM výpočetní metody pro přesnou interpretaci  $^{31}\text{P}$  NMR parametrů nám umožnila vývoj a implementaci nové výpočetní metody pro dynamické průměrování NMR spekter v polymerech (metoda Ad-MD). Použití této metody k interpretaci  $^{31}\text{P}$  NMR spekter v Dickerson-Drew DNA umožnilo určit populace BI a BII strukturních forem v páteři DNA. Dosažené výsledky naznačují, že Ad-MD metodu lze spolehlivě použít pro validaci nových MD silových polí v souladu s NMR experimentem.

**Klíčová slova:** nukleární magnetická rezonance, kvantová mechanika, molekulová dynamika, chemický posun,  $J$  spin-spin konstanta