

Název práce: Ramanova optická aktivita a konformační flexibilita peptidů v roztoku

Autor: Jana Hrudíková

Katedra (ústav) : Fyzikální ústav Univerzity Karlovy

Vedoucí diplomové práce: Doc. RNDr. Vladimír Baumruk, DrSc.

E-mail vedoucího: baumruk@karlov.mff.cuni.cz

Abstrakt: Molekulární flexibilita výrazně ovlivňuje intenzitu a polohu pásů v Ramanových spektrech a v případě ROA spekter i znaménka pásů. Proto je nezbytné ve výpočtech spekter zohlednit dynamické aspekty chování studovaných molekul v roztoku prostřednictvím konformačního středování. První ze studovaných systémů, histidin, hraje díky svému imidazolovému kruhu důležitou roli v metaloenzimech a při sbalování proteinů. Na ROA aparatuře vybudované na Fyzikálním ústavu UK v Praze byla změřena ROA spektra histidinu při několika hodnotách pH, komplexu histidinu s mědí a dipeptidů His-Gly a Gly-His jako předstupeň k dalšímu studiu. Druhý systém, cyklický hexapeptid c-(Phe-D-Pro-Gly-Arg-Gly-Asp), představuje model pro studium β -otoček a antiparalelního skládaného β -listu a byl již studován pomocí VCD a IČ spektroskopie. Z molekulárně dynamických simulací bylo vybráno 10 konformací, pro které byla *ab initio* spočítána Ramanova a ROA spektra. Pro modelový fragment Phe-D-Pro, jehož příspěvek je v Ramanově spektru dominantní, bylo provedeno Boltzmannovo středování příspěvků od 36 konformací.

Klíčová slova: Ramanova optická aktivita, konformační flexibilita, β -otočka, cyklický peptid, histidin