

Modelování interakce proteinů a peptidů s kovovými ionty.

Ondrej Gutten – Diplomová práce

Klíčová slova: Metaloproteiny, selektivita pro ionty kovů, *in silico* predikce

Abstrakt: Byla navržena metoda pro *in silico* predikci a odhad schopnosti vybraných peptidů selektivně vázat ionty kovů. Dále byly důkladně otestovány použitelnost a omezení navržené metody.

Studie je rozdělena do tří částí. První část se zabývá použitelností dvou kvantově-chemických metod (DFT, MP2) pro navržený přístup. Testování zahrnuje porovnání s referenčními výsledky získanými metodou CCSD(T), analýzu vlivu použité báze atomových orbitalů, porovnání obou metod při optimalizaci geometrie a analýzu použitého modelu reprezentujícího vodní prostředí. Ve druhé části jsou porovnávány výsledky predikce selektivity vazby iontů kovů v modelových peptidech a v jednoduchých systémech z nich odvozených.

Poslední část diplomové práce popisuje první krok v rozsáhlé snaze prozkoumat obrovské množství jednoduchých modelových systémů, která povede k návrhu metaloproteinů s definovanými vlastnostmi.