

Souhrn

Tato diplomová práce pojednává o molekulárně dynamických simulacích roztoků chirálních látek v chirálních rozpouštědlech. Roztoky se skládaly z 2,2,2-trifluoro-1-fenyletanolu, 1-fenyletanolu a 1-fenyletanaminu. Byly zkoumány rozdílnosti v NMR vlastnostech různých kombinací absolutních konfigurací rozpuštěné látky a rozpouštědla. Tyto systémy skutečně vykazaly pro různé kombinace absolutních konfigurací rozdíly v radiálních distribučních funkcích a zastoupení konformerů zjištěných pomocí metody WHAM. Tyto zjištěné výsledky zhruba korelovaly s velikostí experimentálních rozdílů NMR posunů. Dále byla v rámci práce vyvinuta metoda selektivního výběru klastrů, která významně snižuje počet klastrů nutných k dosažení konvergované průměrné hodnoty.

klíčová slova: chiralita, molekulární dynamika, nukleární magnetická rezonance