

Author: Michal Kolář

### **The Role of London Dispersion Forces in DNA structure stability: in silico experiment**

By means of computer simulations the role of the dispersion forces was elucidated. The free energy calculations obtained from the biased molecular dynamics and the simulations of the Dickerson's dodecamer of DNA suggested that the dispersion forces are important for the structure determination. While the overall aggregation of the DNA strands is attributed to the hydrophobic effect of the surrounding water, the particular conformation of the DNA, i.e. double helix, is claimed to be stabilised by London dispersion forces. These conclusions are with agreement with the previous theories.

**Keywords:** dispersion force, DNA, molecular dynamics, hydrophobic effect, free energy

Author: Michal Kolář

### **Úloha Londonových disperzních sil ve stabilitě struktury DNA: in silico experiment**

Pomocí metod výpočetní chemie byla vyšetřována úloha disperzních sil ve stabilitě struktury DNA. Za účelem určení volné energie asociace bazí nukleových kyselin ve vodném prostředí byly provedeny molekulově dynamické simulace na pozměněné potenciálové hyperploše a tyto výsledky byly porovnány se simulacemi Dickersonova dodecameru. Disperzní energie byla shledána jako důležitá komponenta vlivů určujících dvojšroubovicovou strukturu DNA, což je ve shodě s předešlými teoriemi.

**Klíčová slova:** disperzní síla, molekulová dynamika, hydrofobní efekt, volná energie, DNA