

ABSTRAKT

Spolehlivá a jednoduše aplikovatelná pravidla jsou potřebná v oblasti biochemie, supramolekulární chemie i materiálových vědách. Zároveň množství informací, které můžeme získat z rentgenových krystalových struktur o povaze rozpoznávacích procesů, je omezené. Lepší pochopení nekovalentních interakcí, které hrají nejdůležitější roli, je potřebné pro přezkoumání univerzálních pravidel, řídících jakékoliv rozpoznávací procesy. V této práci je prezentován systematický vývoj a studium přesnosti výpočetních metod, doplněný aplikacemi na systémech bílkovina•DNA a hostitel•host. Ne-empirické kvantově mechanické nástroje (metody DFT-D, MP2.5, CCSD(T) *atd.*) byly využity v několika projektech. Našli a potvrdili jsme existenci unikátních nízko ležících interakčních energií, vzdálených od zbývajících distribucí v několika párech aminokyselina–báze, které otevírají cestu k univerzálním pravidlům řídícím selektivní navázání jakékoliv sekvence DNA. Dále byly v několika případech provedeny predikce a ověřeny změny Gibbsovy energie (ΔG) a jejich komponentů a nakonec byly pečlivě porovnány s experimenty. Stanovili jsme, že molekula cholinu (Ch^+) je vázána o 2.8 kcal/mol silněji (vypočtením ΔG) než acetylcholin (ACh^+) v samo-uspořádané tří helikální rigidní kleci, odpovídající $K(\text{Ch}^+)/K(\text{ACh}^+) = 109$, což je v poměrně dobrém souladu s experimentální hodnotou 20. Nakonec byla popsána výborná korelace mezi teoretickou a experimentální ΔG pro systémy hostitel•host s molekulou cucurbit[n]urilů ($\text{CB}[n]$). Byla provedena predikce, že vazba u $\text{CB}[7]\cdot\text{Diam-4,9-di}(\text{NMe}_2\text{propanoNH}_3)$ by se mohla stát novým světovým rekordem v nekovalentní vazbě. Výše zmíněný derivát diamantanu je nyní připravován experimentálně. Tyto výsledky jasně demonstrují pevnou pozici výpočetní chemie jako komplementárního zdroje informací pro experimenty.