

Byla provedena literární rešerše v oblastech proteosyntézy, MD simulací, DFT a QM/MM metod.

Elongační faktor Tu (EF-Tu) je protein který se účastní proteosyntézy.

Do svého aktivního místa váže GTP, jehož hydrolýza hraje důležitou roli při translaci.

V nedávných simulacích bylo zaznamenáno spontánní vázání sodných iontů do aktivního místa EF-Tu

Z experimentu je přitom známo, že monovalentní ionty stimulují katalytický efekt EF-Tu na GTPázovou reakci.

Systematickými QM/MM výpočty byl tudíž v rámci této práce prozkoumán povrch volné energie hydrolytických reakcí methyl-di-fosfátu (ve vakuu a v implicitních vodních prostředích) a GTP v aktivním místě EF-Tu.

Bylo použito extrapoláční QM/MM schéma ONIOM a DFT.

V souladu s experimenty byl zaznamenán slabý katalytický efekt sodíkového iontu na GTPázovou reakci.

Jeho přítomnost změnila konformaci GTP interakcemi s jeho záporně nabitými kyslíkovými atomy a vyrovnala také náboje na fosfátových skupinách.

To znamenalo především přenos elektronů z gamma na beta-fosfátovou skupinu, což je charakteristické pro mezistavy při hydrolýze GTP.