

Tato práce se zabývá studiem interakcí mezi aminokyselinami s hydrofobním postranním řetězcem a fosfolipidovou monovrstvou na rozhraní voda-vzduch pomocí molekulové dynamiky. Byly provedeny tři simulace: a) simulace leucinu ve vodném roztoku, b) simulace povrchu vodného roztoku leucinu c) simulace roztoku leucinu s monovrstvou fosfolipidů DPPC na povrchu. Tyto simulace ukázaly, že leucin jeví povrchovou aktivitu a má tendenci tvořit klastry, a to přednostně na vodném povrchu. Rovněž bylo zjištěno, že leucin interkaluje mezi molekuly DPPC, což vede ke vzniku drobných pórů v DPPC monovrstvě. Výsledky simulace leucinu s DPPC monovrstvou byly porovnány s výsledky již dříve provedené obdobné simulace pro fenylalanin. Toto porovnání ukázalo, že molekuly fenylalaninu pronikají do DPPC monovrstvy více než molekuly leucinu, ačkoliv hloubka zanoření mezi molekuly DPPC je u obou aminokyselin prakticky stejná.