

# Souhrn

Tato práce se zabývá simulacemi chiroptických spekter pomocí kombinace molekulárně dynamických a kvantově chemických výpočtů. Molekulová dynamika je použita ke zkoumání konformačního chování studovaných systémů (převážně proteinů), kvantová chemie pro výpočet jejich spektrálních vlastností. Výpočetně náročné kvantově chemické metody jsou však omezeny pouze na relativně malé systémy. My jsme překonali tento problém zejména pomocí fragmentace systémů na sadu menších, výpočetně zvládnutelných částí. Tyto fragmenty jsou pak použity pro výpočet spektrálních vlastností, které jsou následně přeneseny zpět na původní molekulu.

Studována jsou spektra vibrační optické aktivity (VOA) proteinových systémů (fibrily poly-L-glutamové (PLGA) kyseliny, prefibrilární formy insulinu a globulární proteiny v nativním stavu). Simulovaná spektra většinou uspokojivě souhlasila s experimentem a byla použita k jeho interpretaci. V případě spekter Vibračně Cirkulárního Dichroismu (VCD) poly-L-glutamové kyseliny simulovaná jen spektra kvalitativně reprodukovala experiment. Ve výpočtech jsme byli např. schopni reprodukovat silný pás v oblasti amidu I a slabší negativní pás patřící karboxylové skupině postraního řetězce.

Podobná výpočetní procedura byla pak použita na soubor vybraných globulárních proteinů. Jejich spektra Ramanovy optické aktivity (ROA) poskytla uspokojivou přesnost a simulovaná spektra mohla být použita k interpretaci experimentálních výsledků. Byli jsme schopni reprodukovat experimentální rozdíly mezi převážně  $\alpha$ -helikálním lidským sérovým albuminem a concanavalinem A obsahujícím převážně struktury  $\beta$ -skládaného listu, a nebo mezi velmi podobným lidským a slepičím lysozymem. V případě insulinových fibril jsme zjistili, že ROA technika je velmi citlivá ke konformačním změnám proteinů a ze spekter jsme byli schopni extrahovat informace o molekulové struktuře.

Dále byly provedeny dvě studie v oblasti spektroskopie elektronového cirkulárního dichroismu (ECD) a cirkulárně polarizované luminiscence (CPL). První byla zaměřena na to, jak kovové ionty ovlivňují ECD spektrum jejich komplexu s Monensinem. Druhá se zabývala CPL europiového komplexu indukovanou interakcí s aminokyselinou.

Součástí práce jsou také metodické projekty zahrnující implementaci helikálních periodických podmínek v molekulární dynamice a přenos frekvenčně závislé polarizovatelnosti pro výpočet UV-vis a ECD spekter velkých systémů.

**Klíčová slova:** molekulární dynamika, simulace spekter, kvantová chemie, chiralita, optická aktivita