

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 potřebný 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 řídící selektivní navázání jakékoliv sekvence DNA. Dále byly v několika případech provedeny predikce a ověřeny změny Gibbsovy energie (ΔG), jejích komponentů a nakonec pečlivě porovnány s experimenty. Stanovili jsme, že molekula cholinu je vázána o 2.8 kcal/mol silněji (vypočtením ΔG) než acetylcholin v samo-uspořádané tří helikální rigidní kleci, odpovídající $K_{ch}/K_{ach} = 109$, což je v poměrně dobrém souhlasu s experimentální hodnotou 20. Nakonec byla popsána výborná korelace mezi teoretickou a experimentální ΔG pro systémy hostitel•host s molekulou cucurbit[*n*]urilů (CB[*n*]). Byla provedena predikce, že vazba u CB[7]•Diam-4,9-di(NMe₂propanoNH₃) by se mohla stát novým světovým rekordem v nekovalentním vazbě. Výše zmíněný derivát diamantanu je nyní připravován experimentálně. Tyto výsledky jasně demonstrují pevnou pozici výpočetní chemie jako komplementárního zdroje informací pro experimenty.