
Abstrakt (CZ)

Ionty kovů jsou lákavým nástrojem pro organismy díky rozmanitosti funkcí, které mohou nabídnout, pokud jsou správně rozlišeny. Analýza selektivity pro ionty kovů je z výpočetního hlediska náročná, hlavně kvůli složitosti elektronické struktury a solvatačních efektů. Práce představuje protokol založený na teorii hustotního funkcionalu pro předpověď selektivity pro systémy vážoucí ionty kovů. Nejdůležitější částí práce je diskuse o velikostech a zdrojích chyb, a to jak pro komplexy iontů kovů, tak pro malé peptidy. Práce je postavena na čtyřech původních článcích. Obsahuje testování proti referenčním výpočetním a experimentálním datům, případovou studii ověřující protokol pro získání energetických a strukturálních poznatků a pokouší se aplikovat protokol na peptidové systémy.