

Protein rekovertin, lokalizovaný ve vnějším segmentu membrán v tyčinkách v oku, je zapojen do adaptace na světlo a tmu. Tento vápníkový senzor podléhá při změně koncentrace vápníku konformační změně a dochází k vysunutí posttranslačně modifikovaného N-konce, myristoylu, ven z jádra proteinu. Následně rekovertin zakotví za pomoci myristoylu do membrány. Vazba rekovertinu na membránu je reverzibilní a závisí na koncentraci vápníku a konformaci rekovertinu. Tato práce se zabývá energetikou tohoto procesu s cílem objasnit, jakou měrou myristoylová modifikace na vazbu rekovertinu na membránu přispívá. Konkrétně se věnuje profilu volné energie zasunutí samotného myristamidu do membrány a elektrostatického příspěvku z vazby nemyristovaného rekovertinu na membránu. Dále se práce zabývá vzájemným porovnáním těchto výsledků i konfrontací s experimentálními daty. K výpočtům profilů volné energie jsou využity metody molekulové dynamiky a deštníkového vzorkování. Tato práce též přispívá k objasnění procesu zanořování myristamidu do membrány a k pochopení fungování dosud nepopsaného procesu konformační změny rekovertinu a jeho následné vazby na membránu.