

Abstrakt

Do jaké míry konformační preference ukrytá v základních stavebních blocích proteinů určuje jejich trojrozměrnou strukturu? Rozsáhlé kvantové-chemické výpočty spojené s moderními solvatačními metodami představují jedinečnou sadu nástrojů k objasnění klíčových faktorů biomolekulární struktury *ab initio*. Na modelových systémech představujících krátké peptidové fragmenty byl provedeno úplné konformační vzorkování (sampling). Získané výsledky ukazují, jak tyto konformační preference mohou spoluurčovat tvorbu prostorové struktury proteinů. Zároveň poskytují nesmírně cenná data pro nalezení optimálního algoritmu, který účinně dosáhne pokrytí (ideálně všech) nízkoenergetických konformerů delších a delších peptidových fragmentů.

Klíčová slova: Konformační prostor, struktura proteinů, peptidy, solvatační metody, Ramachandranův diagram, DFT-D3 metody