

**Název:** Teorie a aplikace optické aktivity biomolekul

**Autor:** Monika Krupová

**Vedoucí:** prof. RNDr. Petr Bouř, DSc.

**Pracoviště:** Matematicko-fyzikální fakulta Univerzity Karlovy a Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky

**Abstrakt:**

Tato práce popisuje naše aplikace tří metod chiroptické spektroskopie při studiu chirálních molekul: vibračního cirkulárního dichroismu (VCD), cirkulárně polarizované luminiscence (CPL) a magnetického cirkulárního dichroismu (MCD). VCD a indukovanou CPL lanthanoidů jsme použili ke studiu struktury amyloidních fibril vybraných proteinů. Zjistili jsme, že VCD je velmi vhodnou technikou k detekci proteinových fibril a jejich supramolekulární chiralitě. Je schopná rozlišit i různé polymorfické typy fibril. Na druhou stranu, indukovaná CPL lanthanoidů reflektuje spíše lokální strukturu. VCD jsme použili i ke studiu hydratace a polymorfismu krystalů nukleosidů. Díky uspořádání krystalu jsme naměřili silný VCD signál specifický pro hydratovanou a suchou formu. Poslední část práce je věnována MCD a elektronové struktuře trivalentních  $\text{Ln}^{3+}$  iontů. Experimentální spektra byla interpretována pomocí kombinace molekulové dynamiky, teorie krystalového pole (CFT) a výpočtů využívajících konfigurační interakci v úplném aktivním prostoru pro více stavů s poruchovou teorií druhého řádu (MS-CASPT2). Bylo zjištěno, že CFT poskytuje lepší shodu s experimentálními energiemi elektronových přechodů, zatímco metoda MS-CASPT2 poskytuje lepší spektrální intenzity.

**Klíčová slova:** optická aktivita, chiroptická spektroskopie, vibrační cirkulární dichroismus, cirkulárně polarizovaná luminiscence, lanthanoidy, amyloidní fibrily proteinů, magnetický cirkulární dichroismus, kvantově-chemické výpočty