

Abstrakt

Název: *Určování strukturních a dynamických vlastností biomolekul pomocí teoretických výpočtů parametrů spekter NMR*

Autor: Ladislav Benda, ladislav.benda@gmail.com

Katedra/Ústav: Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i.

Vedoucí doktorské práce: Dr. Vladimír Sychrovský, Ústav organické chemie a biochemie AV ČR, v.v.i., vladimir.sychrovsky@uochb.cas.cz

Abstrakt: Předkládaná doktorská práce se zaměřuje na teoretické modelování parametrů spekter nukleární magnetické rezonance (NMR) v peptidech a nukleových kyselinách. Modelovány byly především závislosti NMR parametrů na molekulární struktuře a solvataci. Velký důraz byl kladen na porovnání vypočtených dat s experimentem. Studovanými modely byly především di-peptid L-alanyl-L-alanin (AA) a fosfátová skupina páteře nukleových kyselin. Na základě výpočtů se podařilo určit konformace všech tří nabitych forem AA v roztoku a vysvětlit experimentálně pozorované změny NMR parametrů při změnách pH. Byly kalibrovány závislosti NMR kros-korelovaných relaxačních rychlostí na geometrii molekuly AA. ^{31}P NMR parametry ve fosfátu nukleových kyselin byly systematicky modelovány v závislosti na konformaci a solvataci fosfátu. Navrhli jsme pravidla pro kvalitativní strukturní interpretaci dvojvazných jaderných spin–spinových konstant $^2J_{\text{PC}}$. Podařilo se modelovat změny ^{31}P NMR parametrů způsobené koordinací iontu Mg^{2+} k fosfátu nukleových kyselin. Byly úspěšně simulovány nízkofrekvenční pásy v Ramanových spektrech vodných roztoků solí iontu Mg^{2+} .

Klíčová slova: kvantově-chemické výpočty, NMR parametry, peptidy, nukleové kyseliny, kovové ionty