

Abstrakt česky

Volná energie sbalení proteinu představuje pozoruhodnou rovnováhu mezi stabilizujícími a destabilizujícími nekovalentními interakcemi. V této práci stabilizující energii rozkládáme na fyzikálně smysluplné příspěvky, které by jsme následně dokázali složit do konzistentního transferabilního obrazu teplotní stability. Empirickým potenciálem vypočteme interakční energie mezi fragmenty klasifikovanými na základe jejich fyzikálních vlastností na skupine 1200 neredundantních struktur z PDB databáze. Výsledkem práce je lepší pochopení vztahu mezi interakčními energiemi vypočtenými metodami teoretické chemie a příspěvkami jednotlivých interakcí na této rovnováze.