

## 7 Závěrečné shrnutí

Cílem předkládané práce bylo zkoumat interakce aromatických skupin a jejich význam v procesech chemického a biologického rozpoznávání. Především byla s pomocí vysoce přesných kvantově chemických výpočtů studována úloha aromatických residuí v hydrofobním jádře proteinu pro stabilitu jeho naivní struktury. Bylo ukázáno, že interakce aromatických residuí nejen s ostatními aromatickými a s alifatickými řetězci, ale také interakce s peptidovou částí hlavního řetězce mohou poskytovat významný příspěvek ke stabilizaci proteinu. Dále byly detailně studovány dva specifitější případy aromatických interakcí, interakce s prolinem a interakce aromát-peptidová vazba.

Kapitola o IEM se věnovala aromatickým interakcím v širším kontextu interakcí všech residuí v proteinu. Bylo ukázáno, že aromatická residua hrají klíčovou úlohu ve stabilizaci modelového proteinu Trp-cage. Dále bylo ukázáno, že IEM může být použita jako spolehlivá metoda pro identifikaci těchto klíčových residuí. Bylo testováno několik výpočetních metod, a z výsledků vyplývá, že metoda IEM, použitá společně se silovým polem parm94 a GB modelem rozpouštědla, poskytuje uspokojivé výsledky při zanedbatelném výpočetním čase i pro velké proteiny, což činí tuto metodu užitečným nástrojem pro analýzu struktury proteinů s mnoha možnými aplikacemi.

Poslední kapitola se zabývala aromatickými interakcemi ve dvou příkladech reakcí katalyzovaných aromatickými organickými katalyzátory. Výsledky ukázaly, že interakce mezi katalyzátorem a aromatickou částí substrátu hrají významnou úlohu v TS těchto reakcí. Kromě toho byly pro reakci katalyzovanou Quinoxem vypočteny rozdíly v Gibbsově volné energii pro TS vedoucí k opačným enantiomerům pro oba dva možné mechanismy reakce. Takto teoreticky předpověděné hodnoty jsou ve velmi dobré shodě s experimentálně získanými daty.

Šest původních vědeckých článků,<sup>[1-6]</sup> které doplňují předkládanou práci, je připojeno v dodatku.