

## Abstrakt:

Hlavní metodou uplatněnou v této práci byly klasické molekulárně-dynamické simulace. Simulovanými systémy byly komplexy RNA-dependentní-RNA polymerázy, Ribonukleázy H, Argonautu a Ribonukleázy L s chemicky modifikovanými nukleovými kyselinami. Motivací bylo využití těchto chemicky modifikovaných nukleových kyselin jako potenciálních chemoterapeutik. Výkonné grafické karty, prostřednictvím nichž byly molekulárně-dynamické simulace provedeny, umožnily získat trajektorie o délce stovek nanosekund až jedné mikrosekundy, což umožnilo postihnout rozdíly ve vazbě různě modifikovaných nukleových kyselin k výše uvedeným enzymům. Zjištěné rozdíly přitom odpovídaly experimentálním výsledkům, což otevírá prostor pro racionální návrh struktury potenciálních chemoterapeutik na bázi chemicky modifikovaných nukleových kyselin.