

# Abstrakt Diplomové Práce

Jakub Jungwirth

Porozumění molekulární struktury molekul relevantních v biochemii zajímavé z fundamentálního hlediska, jelikož v konečném důsledku tyto molekuly jsou určující pro všechny role živých organismů. Ramanova optická aktivita (ROA) je chiroptická spektroskopická technika s vysokou citlivostí k molekulární struktuře. V této závěrečné práci je prezentován úvod ke konceptům důležitým pro ROA a dva nezávislé projekty, jejichž cílem je rozšíření možností ROA a to jak z teoretického tak experimentálního hlediska. První projekt je konformační analýzou dialaninu, důležitého modelového peptidu. K simulaci spekter byl použit přístup kombinující kvantově mechanické metody a metody molekulové dynamiky. Výsledkem byla dříve nedosažená shoda výpočtu s experimentem. Metoda matematického rozkladu experimentálního spektra do spekter vypočtených pro jednotlivé konformery byla naprogramována a otestována. Jejím cílem je získání informací o rovnovážném zastoupení jednotlivých konformerů. Tento přístup se ukázal být slibným. Druhý projekt byl pokusem o provedení průkopnických ROA měření amyloidů, které je obtížné měřit kvůli jejich nehomogenitě (nerozpustnost, dvojlom). Výsledkem je vylepšený protokol přípravy těchto vzorků. Co se ROA měření týče, byla otestována nová rotační kyveta, u níž byly objeveny závažné problémy s fluorescencí. Dále bylo vyzkoušeno měření v různých polarizačních módech, předběžné výsledky ukazují, že SCP uspořádání je nejméně náchylné k falešným signálům. Konečného cíle, tedy reprodukovatelného měření ROA amyloidů, nebylo dosaženo.