

Práce se zabývá různými metodami výpočtu volné energie pomocí molekulárně-dynamických simulací za účelem studia inhibice biologických makromolekul a identifikace možných léčiv. Konkrétně byla prozkoumána možnost využití nerovnovážných metod na základě Jarzynského rovnosti a Crooksova flukтуаčního teorému. Použité metody byly otestovány na jednoduchých systémech aminokyselin a komplexu éterové koruny s draslíkem. Následně byly zkoumané metody aplikovány na komplexy adamantánů s cyklodextriny a především na inhibici hlavní proteázy SARS-CoV-2 Mpro.