

Title: Molecular simulation of acid-base properties of short peptides and the A β -(1-42) peptide

Author: Bc. Magdaléna Nejedlá

Department: Department of Physical and Macromolecular Chemistry

Supervisor: doc. RNDr. Peter Košovan, Ph.D.

Abstrakt:

Tato práce se zabývá molekulovými simulacemi peptidů v acidobazické rovnováze. V první části jsme se zaměřili na 4 pentapeptidy. Pomocí simulace hrubozrným modelem jsme určili stupeň ionizace jejich postranních řetězců, hodnoty jejich efektivních pK_a a Hillovy koeficienty. Výsledkem je, že náš CG model poskytuje pouze hrubý odhad hodnot pK_a . Výsledky závisí na zvolených parametrech modelu, jejichž vliv na konečnou hodnotu zatím není znám. Ve druhé části naší práce jsme studovali adsorpci peptidu A β -(1-42) na nabitý povrch, který pro naše účely představuje nabitou nanočástici. Úspěšná adsorpce by mohla být způsobem, jak zabránit agregaci peptidu A β -(1-42), který je podezřelý z toho, že způsobuje Alzheimerovu chorobu. Naše předběžné výsledky ukazují, že k adsorpci peptidu A β -(1-42) na nabitý povrch záporně nabité nanočástice dochází při nízkém pH, $1 < \text{pH} < 4$.

Klíčová slova: kyselina, báze, acidobazická rovnováha, pH, peptid, amyloid, nabitý povrch