

Abstrakt:

Polypeptidy jsou základní součástí biologických systémů. Pokud obsahují aminokyseliny s kyselými nebo zásaditými postranními řetězci, mohou v důsledku disociačních reakcí v závislosti na pH nést náboj. Polypeptidy tak mohou být považovány za slabé polyelektrolyty, a jejich pH-responzivní chování, které je důležité z hlediska popisu jejich biologického fungování i potencionálních aplikací, může být studováno v tomto kontextu. Molekulové simulace specificky mají v tomto ohledu dlouhou historii. V této práci je vytvořen zhrubený počítačový model polypeptidu a je zkoumáno, jak parametry modelu jako úroveň detailu v něm nebo parametry systému jako délka řetězce a koncentrace soli ovlivňují chování polypeptidu. Cílem je získat výsledky ze simulací, které by v budoucnu mohli být porovnány s experimentálními výsledky, aby šlo určit, zda je vytvořený model vhodný pro studium těchto systémů i nadále.