

Abstrakt

Motyčka Jozef. *Rozvoj a aplikácia neporuchových metód pre teoretické štúdium molekúl* [Dizertačná práca]. Univerzita Komenského v Bratislave. Fakulta Matematiky, Fyziky a Informatiky; Katedra jadrovej fyziky a biofyziky. Školiteľ: prof. RNDr. Peter Babinec, CSc. Bratislava: FMFI UK, 2024. Počet strán: 233.

Postuláty kvantovej mechaniky sa stali základom pre vývoj pokročilých výpočtových metód kvantovej chémie, ktoré sú nielen komplementárne k iným metodikám výskumu, ale umožňujú v súčasnosti dokonca v mnohých ohľadoch nahradiť laboratórny experiment. V predkladanej dizertačnej práci prezentujeme výsledky prác z oblasti aplikácie metód molekulového modelovania na biologicky významné štruktúry, a rovnako aj z oblasti teoretického prístupu k riešeniu Schrödingerovej rovnice pre špecifické typy Hamiltoniánov. Päť cieľov práce tak môžeme rozdeliť na dve skupiny.

Prvá skupina cieľov je reprezentovaná výsledkami použitia neporuchových, variačných metód pre hľadanie vlastných hodnôt a funkcií Hamiltoniánov. Opierali sme sa predovšetkým o Heisenbergovu maticovú mechaniku, ktorá využíva reprezentáciu operátorov polohy a hybnosti v maticovom tvare, a ktorá sa tak stala výpočtovo schodnou variantou pre hľadanie spektier Hamiltoniánu nielen fermión bozónovej interakcie.

Druhá skupina cieľov sumarizuje výstupy z optimalizácie na úrovni metódy funkcionálu hustoty (DFT) a molekulovo-dynamických simulácií interakcií medzi aptamérom a ligandom. Rovnako popisuje štruktúrnu variabilitu proteínového receptora v prostredí explicitného vodného solventu analýzou trajektórie z dynamickej simulácie. Napokon sa tu venujeme analýze fyzikálno-chemických vlastností a reaktivity potenciálneho liečiva prostredníctvom výpočtov na DFT úrovni, ktoré umožnili predpovedať vibračné, UV-

VIS spektrá a skúmať rozloženie elektrónovej hustoty a orbitálov. Dodatočná ADME in silico analýza poskytla pohľad do biologickej distribúcie konjugátu ditranolu s kyselinou salicylovou ako potenciálneho farmaka pre podpornú liečbu psoriázy.

Kľúčové slová: Variačná metóda, Hamiltonián, molekulové modelovanie, DFT