

OBSAH

PŘEDSTAVENÍ AUTORA.....	4
ÚVOD	5
KOMENTÁŘ K PUBLIKACÍM ZAHRNUTÝM DO HABILITAČNÍ PRÁCE	7
1. Studium molekul kyseliny hyaluronové metodou molekulové dynamiky.....	7
1.1. Simulace makromolekul kyseliny hyaluronové v roztocích elektrolytů	8
1.2. Vliv iontů na konformaci a dynamiku oligosacharidů kyseliny hyaluronové	9
1.3. Oligosacharidy kyseliny hyaluronové ve směsných rozpouštědlech.....	10
1.4. Další plány a perspektivy.....	12
2. Rovnováhy a kinetika v roztocích oligomerních proteinů za vysokého tlaku	13
2.1. Simulace vlivu vysokého tlaku na molekulu HIV-1 proteinasy	14
2.2. Rovnovážné a kinetické vlastnosti HIV-1 proteinasy za vysokého tlaku.....	16
2.3. Teoretický popis rovnováh v roztocích oligomerních proteinů za vysokého tlaku.....	18
2.4. Další plány a perspektivy.....	19
3. Kinetika enzymově katalyzovaných reakcí.....	19
3.1. Ovlivnění dimerizace retrovirových proteinas strukturním motivem „fireman’s grip“.19	
3.2. Mechanismus reakce katalyzované šikimátdehydrogenasou z kořene petržele	20
3.3. Fluorescenční substráty pro měření enzymové kinetiky rhomboidových proteinas.....	22
3.4. Enzymologická charakterizace rekombinantní lidské a myší serinové racemasy	23
3.5. Další plány a perspektivy.....	25
4. Výpočty elektronového rozptylu na molekulách metodami kvantové chemie	25
4.1. Výpočty účinných průřezů elastického rozptylu elektronů na molekulách	25
4.2. Výpočty parametrů rezonančního elektronového stavu na molekule F ₂	26
5. Aplikace metod polymerasové řetězové reakce (PCR) a jejich teoretický popis	27
5.1. Enzymologický popis multitemplátové PCR.....	27
5.2. Metoda přímé exponenciální amplifikace a sekvenování (DEXAS).....	28
5.3. Degradace polyvinylalkoholu za denitrifikujících podmínek.....	29
5.4. Příprava apo-cytochromu b rekombinantní expesí v <i>E. coli</i>	30
6. Ostatní publikované práce.....	31
6.1. Inhibice produkce bioplynu produkty degradace biomasy	31
6.2. <i>Ab initio</i> výpočty substituentových konstant pro metodu QSAR.....	32
6.3. <i>Ab initio</i> výpočty hyperplochy potenciální energie radikálového kationtu C ₄ H ₆ ⁺ •	33
ZÁVĚR	34
PŘEHLED LITERATURY.....	35
ABSTRAKT.....	40
ABSTRACT.....	40