



ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

Akademický rok: 2018/2019

Ústav: Národní centrum pro výzkum biomolekul

Studentka: Radka Sedláková

Program: Biochemie

Obor: Chemoinformatika a bioinformatika

Ředitel *Národního centra pro výzkum biomolekul* PŘF MU Vám ve smyslu Studijního a zkušebního řádu MU určuje bakalářskou práci s názvem:

Název práce: Atomové typy v metodách pro výpočet parciálních atomových nábojů

Název práce anglicky: Atom types in methods for calculation of partial atomic charges

Oficiální zadání:

Parciální atomové náboje jsou reálná čísla, jejichž cílem je popsat rozložení elektronové hustoty v molekule. Nacházejí mnohá uplatnění ve výpočetní chemii nebo chemoinformaticce, konkrétně např. v oblastech jako je QSAR/QSPR modelování či jiné aplikace atomových deskriptorů, molekulový docking nebo virtuální screening. Jelikož se jedná pouze o teoretický koncept, nelze je určit experimentálně a existuje tak velké množství jejich definic. Standardní metody výpočtu vycházejí z kvantové mechaniky, nicméně výpočetní náročnost limituje jejich využití pouze na malé systémy. Empirické metody využívající naměřená nebo parametrizovaná data naproti tomu představují výrazně rychlejší alternativu. Parametrizace těchto metod je však netriviální proces, který je ovlivněn řadou faktorů. Jedním z nich je rozdělení atomů do atomových typů, např. dle nejvyššího řádu vazby, hybridizace, chemického okolí ap.

Cíle bakalářské práce jsou:

1. Seznámit se s problematikou parciálních atomových nábojů a metodami jejich výpočtu.
2. Provést rešerši atomových typů objevujících se v literatuře popisující empirické metody.
3. Definovat klasifikátory, které nalezené atomové typy popisují, a implementovat je jako knihovnu jazyka Python.
4. S využitím externího nástroje provést a vyhodnotit parametrizaci metod EEM [1] a PEOE [2] při zavedení různých klasifikací atomů.

[1] Mortier, Wilfried J., Swapan K. Ghosh, and S. Shankar. "Electronegativity-equalization method for the calculation of atomic charges in molecules." *Journal of the American Chemical Society* 108.15 (1986): 4315-4320.

[2] Gasteiger, Johann, and Mario Marsili. "Iterative partial equalization of orbital electronegativity – a rapid access to atomic charges." *Tetrahedron* 36.22 (1980): 3219-3228.

Jazyk závěrečné práce: čeština

Vedoucí práce: RNDr. Tomáš Raček

Datum zadání práce: 10. 10. 2018

V Brně dne: 30. 4. 2019

Souhlasím se zadáním (podpis, datum):

.....
Radka Sedláková
studentka

.....
RNDr. Tomáš Raček
vedoucí práce

.....
doc. RNDr. Oldřich Janiczek, CSc.
zástupce ředitele Národního centra
pro výzkum biomolekul pro
pedagogické záležitosti