

Abstrakt: Předkládaná práce se zabývá aplikací řízených molekulárně dynamických simulací na medicínsky zajímavé biomolekulární systémy. Nejprve byly otestovány metody určení profilu volné energie na modelovém systému $(Ala)_{10}$. Potom jsme se zaměřili na určení profilu volné energie při vazbě ligandu do vazebného místa adenosinového A_{2A} GPC receptoru. Dále jsme určovali profil volné energie spojený s tranzitem iontů přes modelový systém Gramicidinu A. A nakonec jsme tuto metodiku aplikovali na iontový kanál TRPM2.