

V úvodní kapitole diplomová práce seznamuje čtenáře s nejpoužívanějšími nástroji pro editaci lidského genomu (ZFN, TALEN, CRISPR). Následující kapitoly podrobně popisují metodiku MD simulací a výpočty hydratačních a vazebných volných energií. Abychom mohli provést naše výpočty masivně paralelním způsobem, byl zvolen přístup velkého počtu paralelně běžících, krátkých nerovnovážných MD běhů. Z nich jsou získány hodnoty práce, ze kterých dostáváme odhad volné energie hydratace, resp. vazebnou volnou energii. Ty jsou získány pomocí metody Crooks-Gaussova průniku. Zvolená metodika byla nejprve testována ve výpočtech hydratace volné energie bází nukleových kyselin a postranních řetězců aminokyselin. V klíčové poslední kapitole byl studován komplex transkripčního faktoru Zif268 a krátkého segmentu DNA. Účinky bodových mutací jednotlivých párů bází daly nahlédnout do změn vazebné volné energie DNA duplexu.