

Strukturní chemie & molekulární design

Radek Marek (*VS SBMM*)



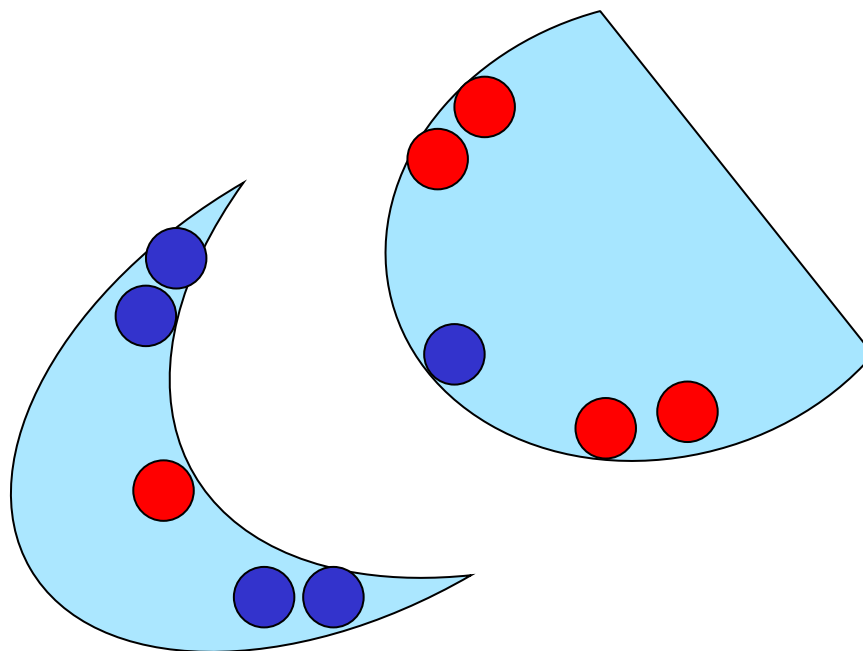
Proč je znalost struktury důležitá?

- protiklady se přitahují
- porozumění – znalost vlastnosti ovlivňující chování
- princip komplementarity v molekulárním rozpoznávání



prostorová

nábojová



Princip komplementarity

(princip zámku a klíče)

- povrchy interagujících molekul
- receptor a antigen
- dynamická komplementarita



- studium chemického/biologického rozpoznávání -
experimentální a/nebo *in silico* (virtuální) screening

Metody

Magnetická rezonance (NMR)

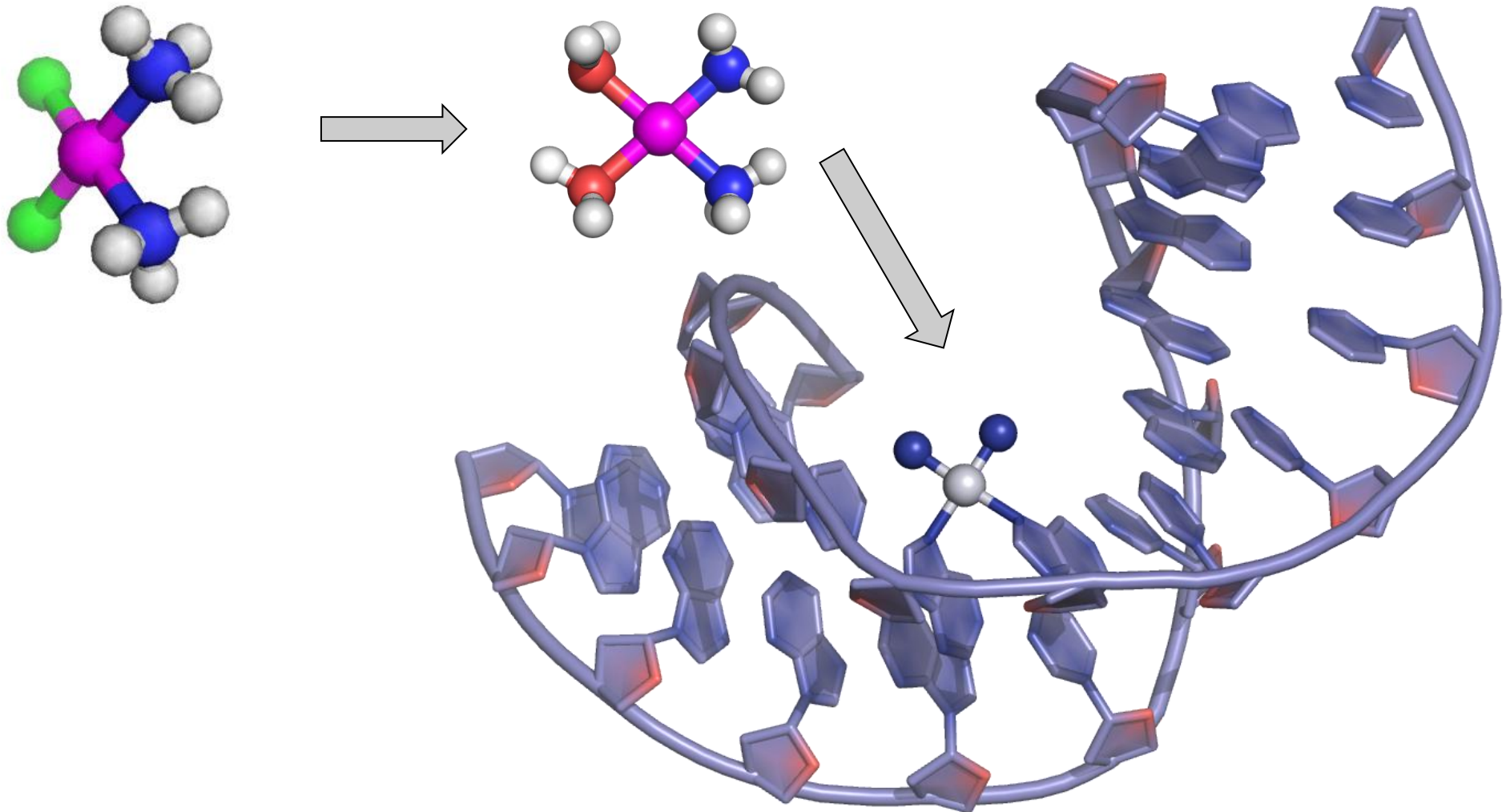
- komunikace s atomovými jádry
v radiofrekvenční oblasti spektra
(struktura, dynamika)



Molekulové modelování & kvantová chemie



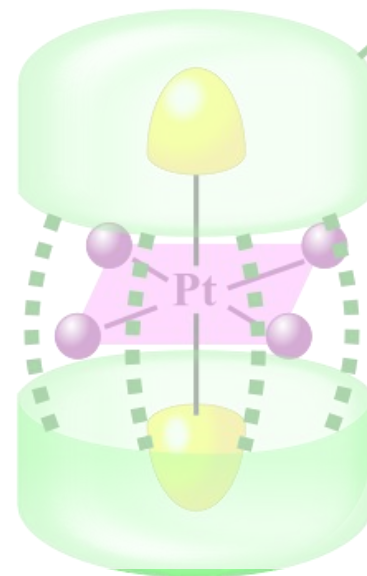
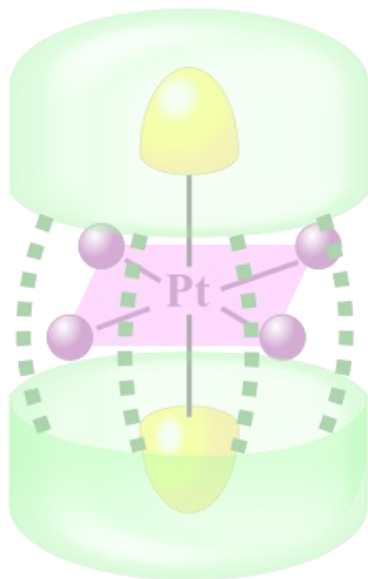
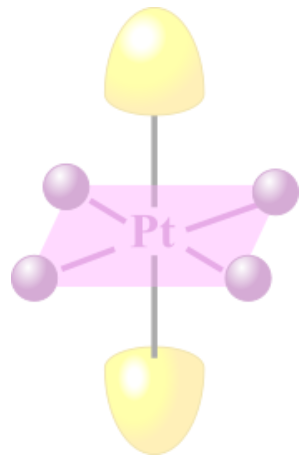
Léčiva (Cisplatina – celosvětově užívaná k léčbě nádorů)



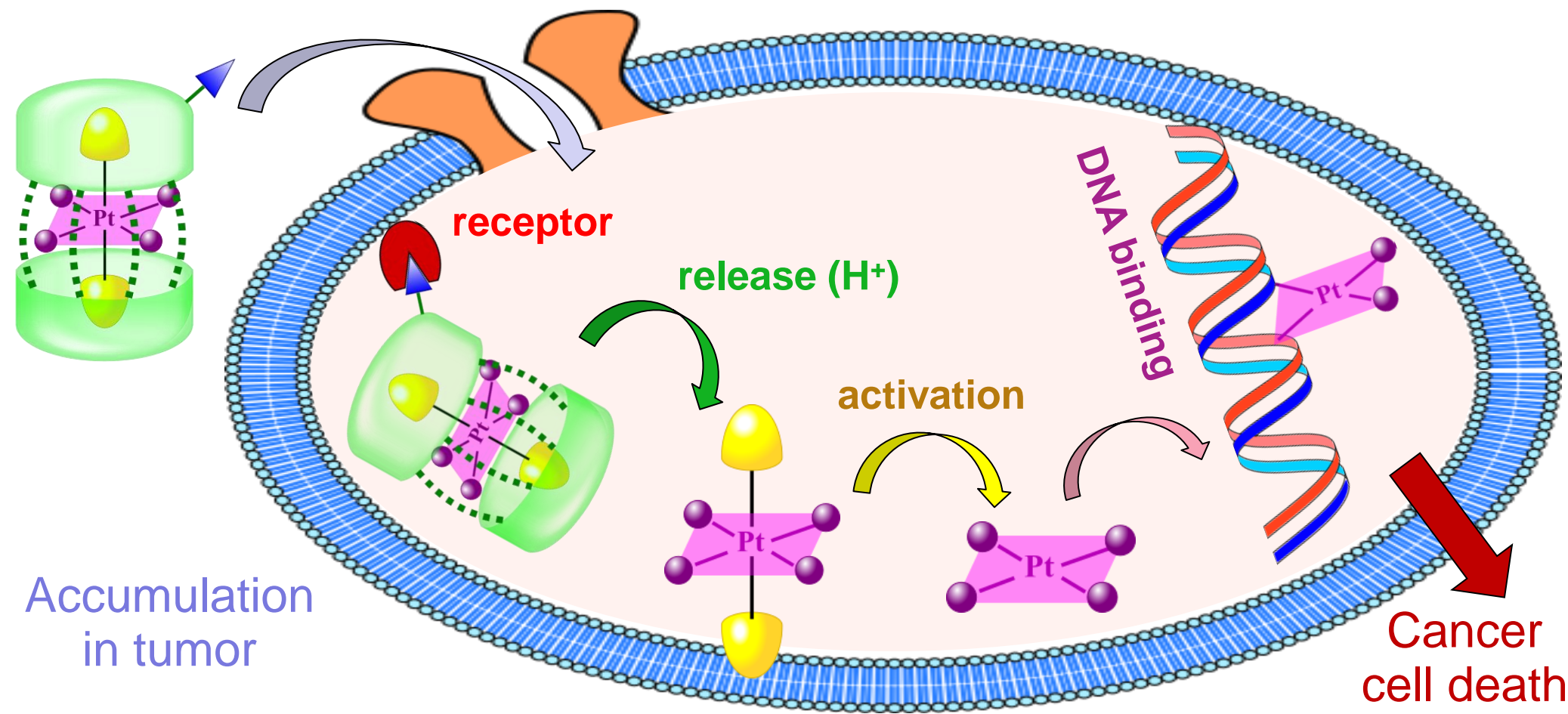
Nespecifický mechanismus účinku – vysoká toxicita, vedlejší účinky
– rezistence

→ vývoj nových léčiv, **nosičů** schválených léčiv

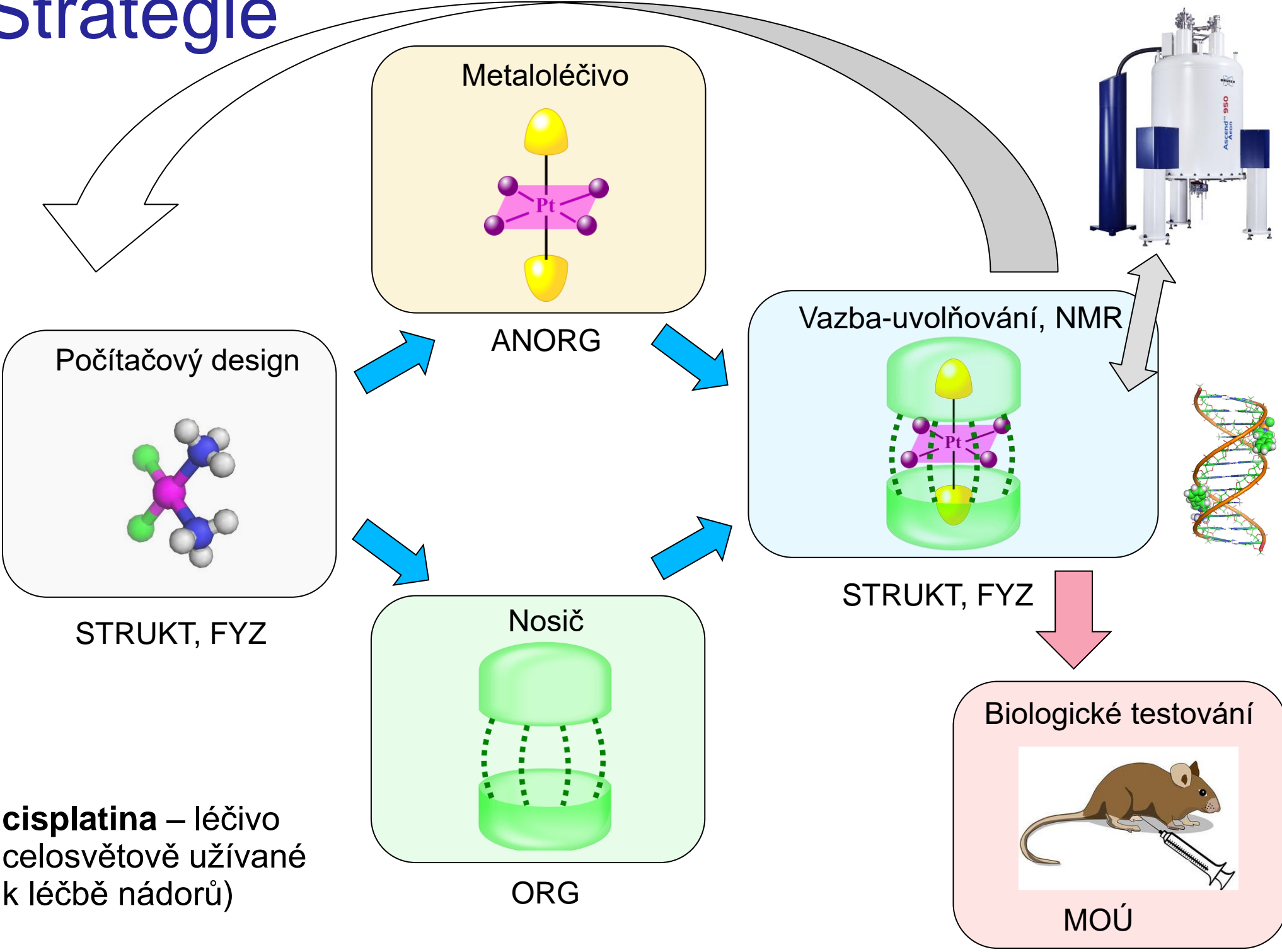
Konzept



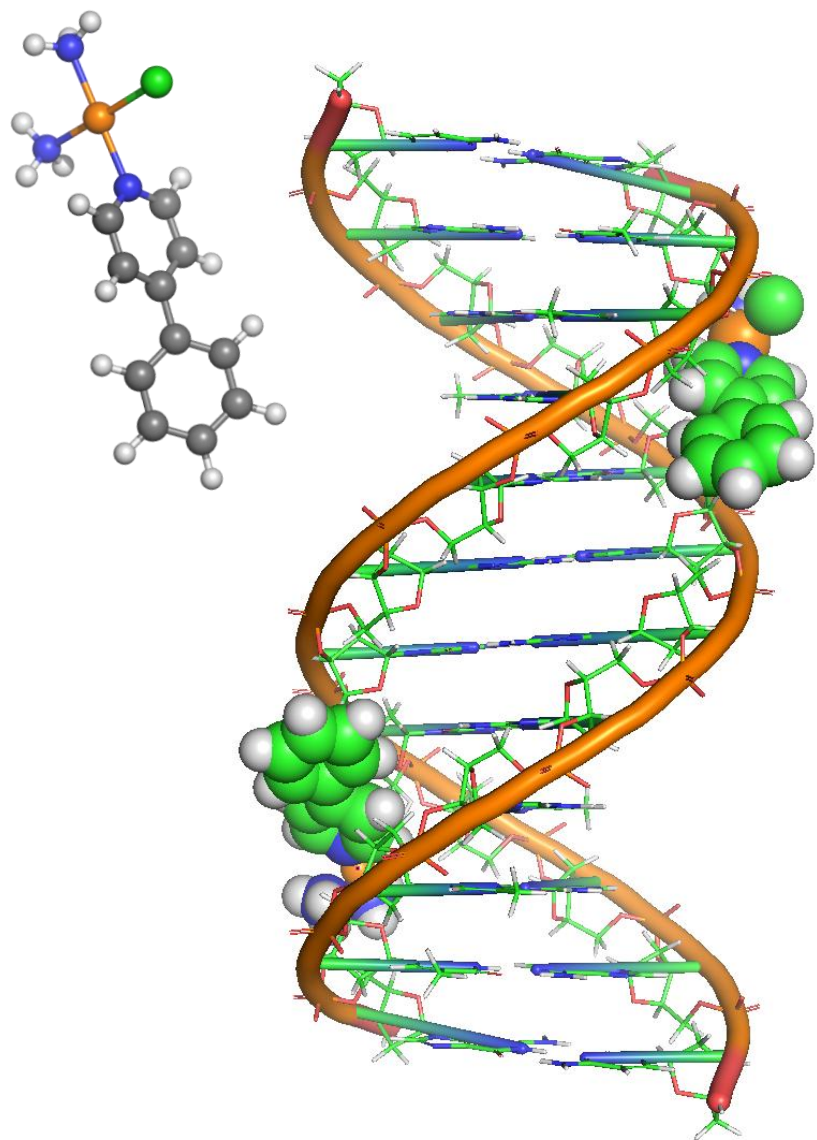
vector
(biotin)



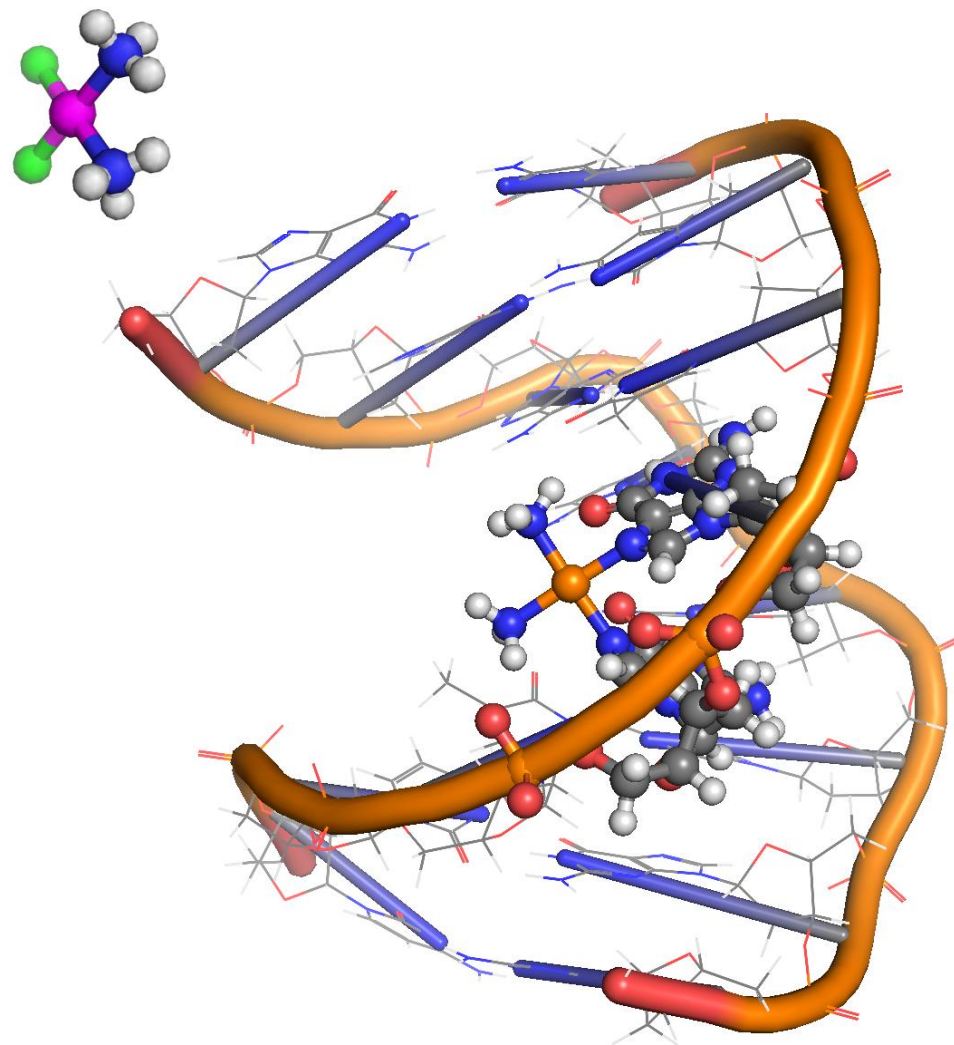
Strategie



Supramolekulární vazba



Koordinační vazba



Proč by tě pozice měla zajímat?

- + Molekulární 3D dobrodružství v oblasti biosystémů nebo materiálů
- + Spolupráce bez hranic - multioborový projekt a zahraniční stáže
- + Studentský mentoring



Chceš se zapojit do výzkumu?

- + Zajímá tě podstata molekulárních dějů?
- + Máš dobrou představivost?

Neváhej
kontaktovat
kohokoli z
výzkumné
skupiny, rádi
poskytneme
další informace.

Radek Marek lab
[@LabMarek](#)

rmarek@chemi.muni.cz
(UČO 381)

