

Hydrofobowa solwatacja halogenowanych ligandów. Pomiary termodynamiczne umożliwiające określenie energii swobodnej wiązania halogenowego.

Coraz większa liczba halogenowanych związków chemicznych staje się kandydatami na potencjalne leki. Także znaczna ilość już dostępnych leków zawiera w strukturze atom fluoru, chloru, bromu lub jodu. Związki takie są zwykle silnie hydrofobowe, co oznacza, że bardzo słabo rozpuszczają się w wodzie. A skoro większość leków podawana jest w wodnej zawiesinie, to należy poszukiwać metod pozwalających na precyzyjny opis oddziaływania tak hydrofobowych substancji z wodnym rozpuszczalnikiem.

Samo poszukiwanie nowych leków odbywa się zwykle wirtualnie, przy użyciu potężnych komputerów. Takie postępowanie jest znacznie prostsze, i przede wszystkim tańsze, niż testowanie na ślepo pośród setek tysięcy dostępnych związków chemicznych. Jednakże w tym celu potrzebny jest dokładny model opisujący w sposób ilościowy nie tylko oddziaływanie danego związku zarówno z np. docelowym białkiem, ale także z czystym rozpuszczalnikiem.

I właśnie tym zagadnieniom poświęcony jest przedstawiony projekt, którego najważniejszą cechą jest zastosowanie do opisu obiektów o potencjalnym znaczeniu biologicznym ścisłych metod stosowanych w naukach fizycznych. Określimy siłę oddziaływania poszczególnych związków z rozpuszczalnikiem, a także efekt, jaki powoduje dodanie cząsteczek cyklodekstryny, której różne pochodne zaczynają być coraz powszechniej stosowane jako nośniki dostępnych już leków.

Otrzymane wyniki zostaną także przeanalizowane pod kątem strukturalnym, a więc zamierzamy badać oddziaływania w mikroświecie, na poziomie interakcji między poszczególnymi atomami. W szczególności zamierzamy zmierzyć i później opisać siłę oddziaływania atomu halogenu z jego otoczeniem.

Mamy nadzieję, że otrzymane wyniki pozwolą na głębsze zrozumienie procesów oddziaływania potencjalnych leków z ich partnerami, a więc także usprawnią komputerowe metody poszukiwania leków.